

THESE DE DOCTORAT D'ETAT ES SCIENCES PHYSIQUES

présentée

A L'UNIVERSITE DE PARIS VII

par

Roland COMBESCOT

pour obtenir le grade de Docteur ès Sciences

Sujet de la thèse:

CONTRIBUTION A LA THEORIE DE L'EFFET TUNNEL.

Soutenue le 17 Décembre 1971 devant la Commission d'Examen:

MM. P. NOZIERES

Président

J. FRIEDEL

C. CAROLI

J.P. HURALT

}
} Examineurs
}



Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à Monsieur le Professeur P.Nozières, Directeur du Groupe de Physique des Solides de l'Ecole Normale Supérieure, dans lequel a été effectué ce travail de recherche. Il m'a proposé le sujet de cette thèse et ses conseils clairvoyants m'ont constamment guidé.

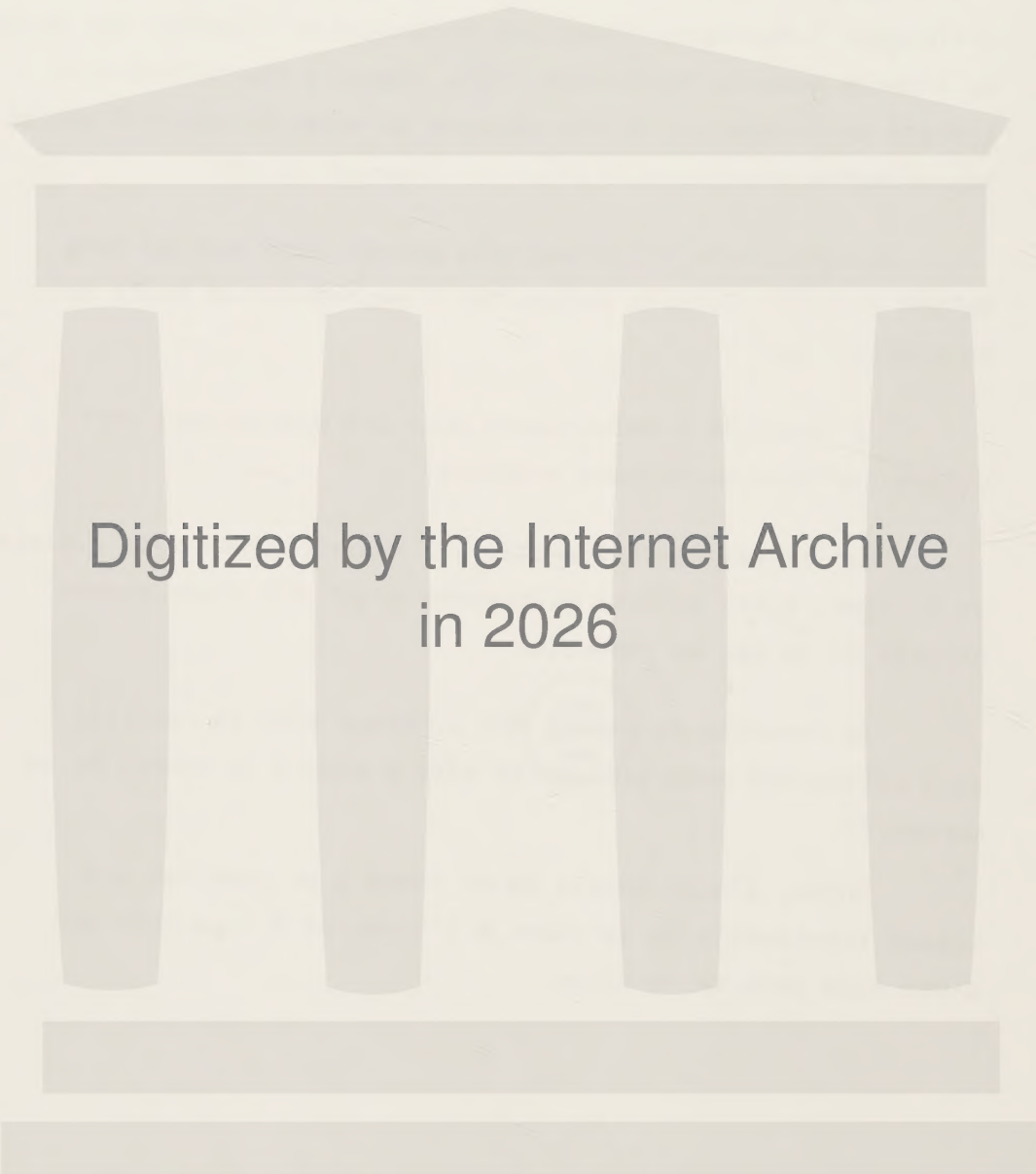
C.Caroli m'a été d'une très grande aide tout au long de mon travail. Qu'elle trouve ici l'expression de toute ma reconnaissance.

Je remercie D.Saint-James pour les discussions fort utiles que nous avons eues ensemble.

Sur le plan expérimental, mes conversations avec J.Klein et A.Léger, ainsi qu'avec G.Schreder m'ont été d'une grande utilité et je les en remercie.

Je remercie également Mme J.Giraud pour la célérité et l'efficacité avec lesquelles elle a assuré la frappe de ce manuscrit.

Enfin, l'aide morale de ma femme a eu pour moi une valeur inestimable et je tiens à l'associer à tous ceux qui m'ont aidé dans cette thèse.



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41556024_0031

INTRODUCTION

L'effet tunnel est vieux comme la mécanique quantique. Dès les premiers développements de la théorie quantique, on a pu prédire qu'un électron a une probabilité non nulle de franchir une barrière de potentiel sous laquelle les lois de la mécanique classique lui auraient interdit de pénétrer. L'application de ce résultat aux cas, entre autres, de la désintégration β (Gamow, 1928), de l'émission de champ (Fowler et Nordheim, 1928) de l'ionisation de l'atome d'hydrogène en champ électrique fort (Oppenheimer, 1928) fournit un des premiers succès expérimentaux de la mécanique quantique. Aussi l'on peut dire que, depuis cette époque, le problème de l'effet tunnel pour un électron isolé (effet tunnel à un électron) est résolu dans le principe ; il reste, bien entendu, la difficulté de calcul pratique résultant éventuellement de la forme de la barrière de potentiel.

D'un point de vue expérimental, l'effet tunnel est resté longtemps cantonné dans le domaine de la physique atomique (et dans celui de la chimie physique). Ce n'est en effet qu'à l'échelle microscopique que l'on pouvait trouver des barrières de potentiel assez minces pour qu'un électron ait des chances non négligeables de la traverser. Faute de pouvoir fabriquer des barrières de cette minceur, le physicien des solides n'était pas concerné. Ce n'est que depuis une vingtaine d'années que les progrès des techniques expérimentales ont permis de modifier cette situation. D'un côté la mise au point des techniques de dopage des semiconducteurs permet de fabriquer des jonctions p-n dans lesquelles les électrons "tunnellent", à travers la bande interdite, de la bande de valence vers la bande de conduction du semiconducteur (ou inversement). D'autre part, grâce aux techniques d'évaporation des couches minces métalliques, on a pu fabriquer des jonctions métal-isolant-métal⁽¹⁾ : on fait une oxydation contrôlée de

CHAPTER I

THE HISTORY OF THE

REIGN OF

CHARLES THE FIRST

IN THE

SEVENTEENTH CENTURY

OF THE

REIGN OF

CHARLES THE FIRST

IN THE

SEVENTEENTH CENTURY

OF THE

REIGN OF

CHARLES THE FIRST

IN THE

SEVENTEENTH CENTURY

OF THE

REIGN OF

CHARLES THE FIRST

IN THE

SEVENTEENTH CENTURY

OF THE

REIGN OF

CHARLES THE FIRST

IN THE

SEVENTEENTH CENTURY

OF THE

REIGN OF

CHARLES THE FIRST

IN THE

SEVENTEENTH CENTURY

OF THE

REIGN OF

CHARLES THE FIRST

IN THE

SEVENTEENTH CENTURY

OF THE

REIGN OF

CHARLES THE FIRST

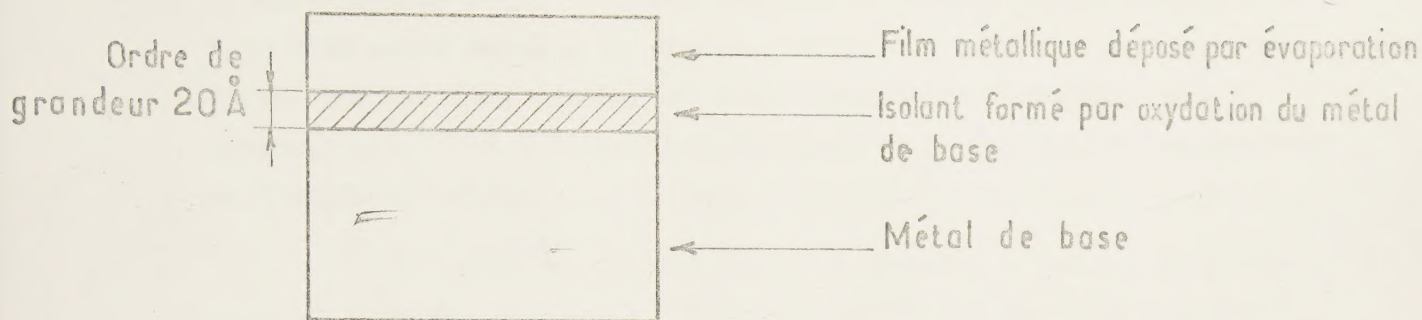
IN THE

SEVENTEENTH CENTURY

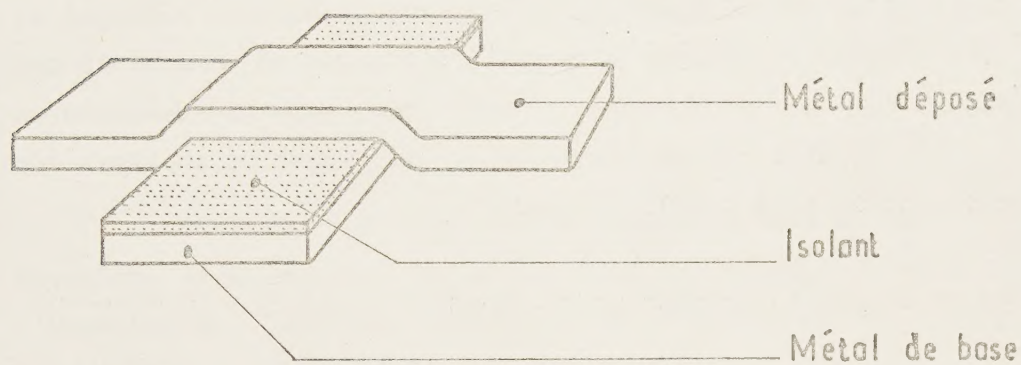
OF THE

REIGN OF

CHARLES THE FIRST



Principe de la fabrication d'une jonction métal-isolant-métal



Aspect général

Fig. 1

la surface d'un métal, et, sur l'oxyde, on dépose par évaporation un film d'un autre métal ; la couche d'oxyde est suffisamment mince pour pouvoir former une barrière tunnel, et assez épaisse pour pouvoir sans claquage supporter les tensions habituellement appliquées (au maximum de l'ordre du volt).

Le calcul du courant tunnel à travers de telles jonctions pose un problème nouveau : l'électron qui tunnelle d'une électrode à l'autre ne peut, en général, être considéré comme isolé. Il interagit avec les autres électrons par l'intermédiaire de phonons, plasmons ou toute autre excitation élémentaire. Il s'agit alors de calculer le courant tunnel en présence de ces interactions, donc de traiter un problème à N corps. De plus, la jonction considérée est hors d'équilibre puisqu'on applique une différence de potentiel finie : le passage du courant est un processus irréversible. C'est l'ensemble de ces deux données qui explique la complexité du problème.

Bardeen⁽²⁾, en 1961, fût le premier à aborder la question. Il suivit pour cela une démarche analogue à celle d'Oppenheimer⁽³⁾ dans son traitement de l'ionisation de l'atome d'hydrogène en champ fort.

Il considère que le passage d'un électron de l'électrode de gauche à l'électrode de droite correspond à la transition de cet électron d'états localisés à gauche vers des états localisés à droite. La probabilité de transition est calculée par une méthode de perturbation à l'ordre le plus bas. Sa méthode fût formalisée par Cohen, Falicov et Phillips⁽⁴⁾ qui introduisirent explicitement un "hamiltonien tunnel" permettant aux électrons de passer d'une électrode à l'autre. Cet hamiltonien est également traité en perturbation. Cette méthode fût développée dans deux directions.

D'une part, Duke et ses collaborateurs^(5,6) développèrent le formalisme de l'hamiltonien tunnel. Ils l'utilisèrent pour traiter différents problèmes d'interactions dans les électrodes. Ils l'étendirent d'autre part au cas où l'électron interagit avec des excitations de la barrière pendant son passage.

Une autre voie fût développée par Appelbaum et Brinkman⁽⁷⁾. Elle consistait à reprendre le calcul de Bardeen et à le pousser, sans introduire de façon "ad hoc" un hamiltonien tunnel. Zawadowski⁽⁸⁾, bien antérieurement, présenta une méthode dont l'essence était la même mais dont le formalisme était d'emblée différent. Le point commun de ces deux approches est qu'elles n'introduisent aucun "a priori" comme l'hamiltonien tunnel. On avance par conséquent en terrain sûr, quoique difficile, et l'on peut essayer d'examiner la validité des approximations qui sont faites : c'est ce que, plus particulièrement, Zawadowski a entrepris de façon détaillée. De plus, ces méthodes permettent d'étudier les phénomènes dûs à l'existence des interfaces, ce qui n'est pas possible avec le formalisme de l'hamiltonien tunnel.

Toutes ces approches ont un point commun : elles utilisent le fait que la probabilité de passage d'un électron d'une électrode à l'autre est petite pour faire un calcul de perturbations au premier ordre. Mais ce traitement diffère des calculs de perturbations usuels en ce qu'il n'y a pas, dans l'hamiltonien du système, une quantité petite (un potentiel par exemple) que l'on traite en perturbation. La seule quantité physique petite du problème est le courant et, dans le calcul, cela provient de ce que les états considérés (localisés dans l'électrode de gauche ou celle de droite) ne sont pas exactement localisés, ne sont pas exactement orthogonaux, ne sont pas exactement états propres du système. Le formalisme qui en découle n'est donc pas très clair. C'est à cette situation qu'on cherche à remédier en introduisant un hamiltonien tunnel qu'on puisse considérer comme une perturbation.

En fait, dans le calcul du courant tunnel, ce qu'on cherche surtout, c'est la possibilité d'exprimer le résultat en fonction de quantités relatives à deux systèmes isolés. Dans une telle division, comme nous le verrons, la barrière est incluse, soit totalement dans l'un des deux systèmes, soit pour partie dans l'un et pour partie dans l'autre. Une telle forme a été imposée par l'interprétation des premières

expériences où une électrode est supraconductrice⁽⁷⁾. Nous avons donc développé une nouvelle approche basée sur ce point de vue. On s'aperçoit alors que l'hypothèse d'un courant tunnel faible n'est nullement indispensable. Dans notre méthode, on définit d'emblée, par leur hamiltonien respectif, des systèmes rigoureusement isolés. La différence entre l'hamiltonien total du système et ces deux hamiltoniens constitue l'hamiltonien de couplage qui permet à un électron de passer d'une électrode à l'autre. Il remplace en quelque sorte l'hamiltonien tunnel. Mais, contrairement à ce dernier, son existence est parfaitement justifiée et il est clairement défini. De plus, comme nous le verrons, on peut en prendre une forme extrêmement simple. Mais, comme on ne peut pas tout avoir, cet hamiltonien de couplage ne peut en aucun cas être considéré comme petit. Il faut donc le traiter en perturbation à tous les ordres, ce qui est possible à cause de la simplicité de son expression.

D'autre part, comme on l'a vu, le système dans son ensemble est hors d'équilibre dès que la différence de potentiel entre les deux électrodes n'est pas nulle. Dans les autres méthodes, cette différence de potentiel peut être quelconque puisque le passage du courant tunnel lui-même est traité au premier ordre. Dans notre cas, puisque l'hamiltonien de couplage est traité à tous les ordres, on ne peut pas se contenter, comme on le fait en général pour traiter les processus irréversibles, de considérer le courant comme la réponse linéaire à un couplage faible. Nous avons donc utilisé la généralisation du calcul des perturbations au cas des systèmes hors d'équilibre qui a été développée par Keldysh⁽⁹⁾ puis par Craig⁽¹⁰⁾. Elle nous a permis de traiter formellement complètement le problème.

Notre approche de l'effet tunnel a été longuement développée dans plusieurs publications^(11,12,13,14). Il n'est pas nécessaire d'y revenir en détail. Nous examinerons plutôt le principe des autres méthodes qui ont été utilisées

pour étudier l'effet tunnel, ce qui n'avait pas été fait dans nos publications. Nous essaierons de dégager leurs côtés positifs et leurs déficiences et de mettre en évidence le progrès que constitue notre méthode ; nous pourrons ainsi faire le point sur un certain nombre de questions expérimentales.

Dans une première partie, nous présentons donc notre méthode en nous restreignant aux principes et en examinant les approximations. Nous nous limitons à ce qui est nécessaire pour la compréhension des principaux phénomènes physiques et nous éliminons tous les détails de caractère technique.

Puis, dans une seconde partie, nous passons en revue les différentes approches en examinant les principales difficultés et en précisant la position de notre méthode par rapport à ces difficultés.

Enfin, nous terminerons en précisant nos résultats et notre position sur certains concepts qui se dégagent des expériences, ou ont été utilisés pour les interpréter.

I - Calcul direct du courant tunnel

A - L'hamiltonien du système

D'une façon générale, une jonction tunnel (Fig. 2) se présente comme la réunion de deux systèmes, l'un de "gauche", l'autre de "droite", chacun étant séparément à l'équilibre. Les niveaux de Fermi des deux systèmes n'étant pas égaux, il se crée de l'un vers l'autre un courant d'électrons. On cherche à exprimer ce courant en fonction de grandeurs relatives aux deux systèmes isolés.

La jonction tunnel étant donnée, il existe de multiples façons de définir les deux systèmes. Celui de gauche sera formé de l'électrode de gauche et de n'importe quel morceau de la barrière isolante attenante à l'électrode de gauche, celui de droite sera formé de l'électrode de droite et du reste de la barrière. Remarquons que lorsque les niveaux de Fermi des deux électrodes ne sont pas égaux, il existe dans la barrière un champ électrique non nul, le potentiel n'y est pas constant. Lorsqu'on divise la jonction en deux systèmes isolés, on ne modifie pas cette forme de potentiel (cf. Fig. 2 et 3). L'isolement des deux systèmes signifie simplement que les électrons ne peuvent sortir d'un système pour aller dans l'autre.

Dans tout ce qui suit, nous prendrons la définition suivante : le système de gauche sera l'électrode de gauche, le système de droite sera la réunion de la barrière et de l'électrode de droite. Il peut sembler artificiel de définir ainsi le système de droite par la réunion de deux régions aussi physiquement différentes qu'une barrière isolante et une électrode ; mais, si nous le voulons, nous n'aurons qu'à exprimer les propriétés de ce système en fonction de celles de la barrière et de l'électrode isolées pour retrouver une description physique plus naturelle.

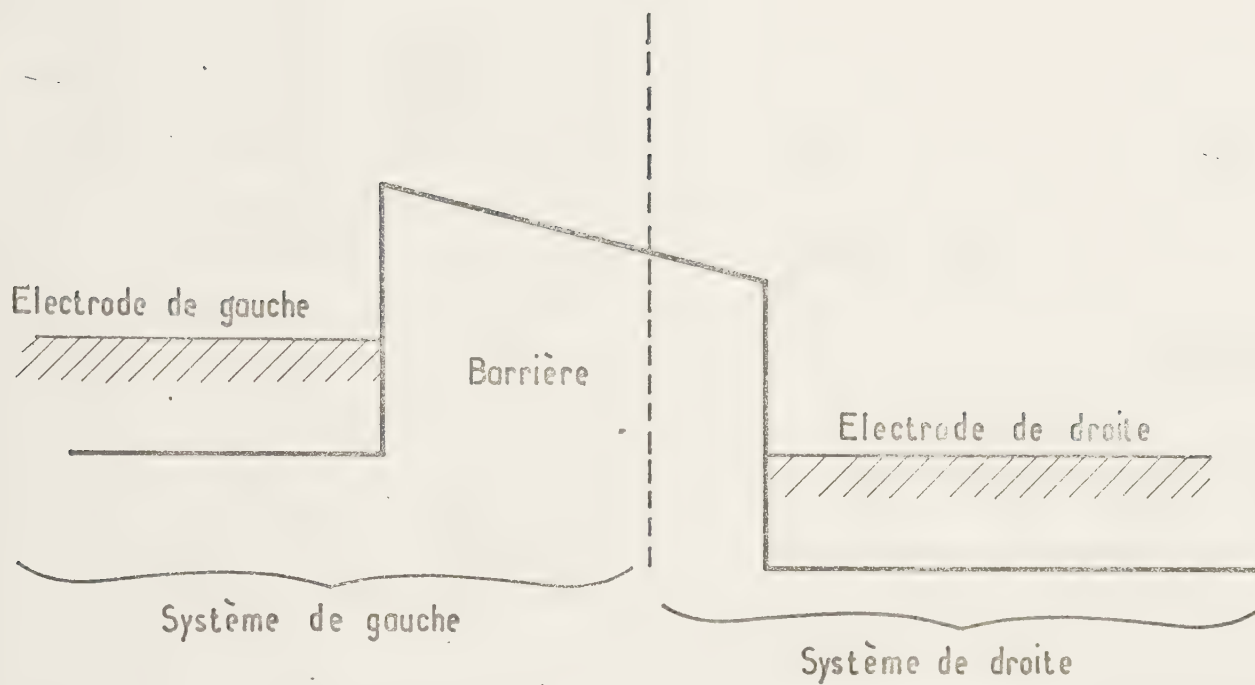


Fig. 2

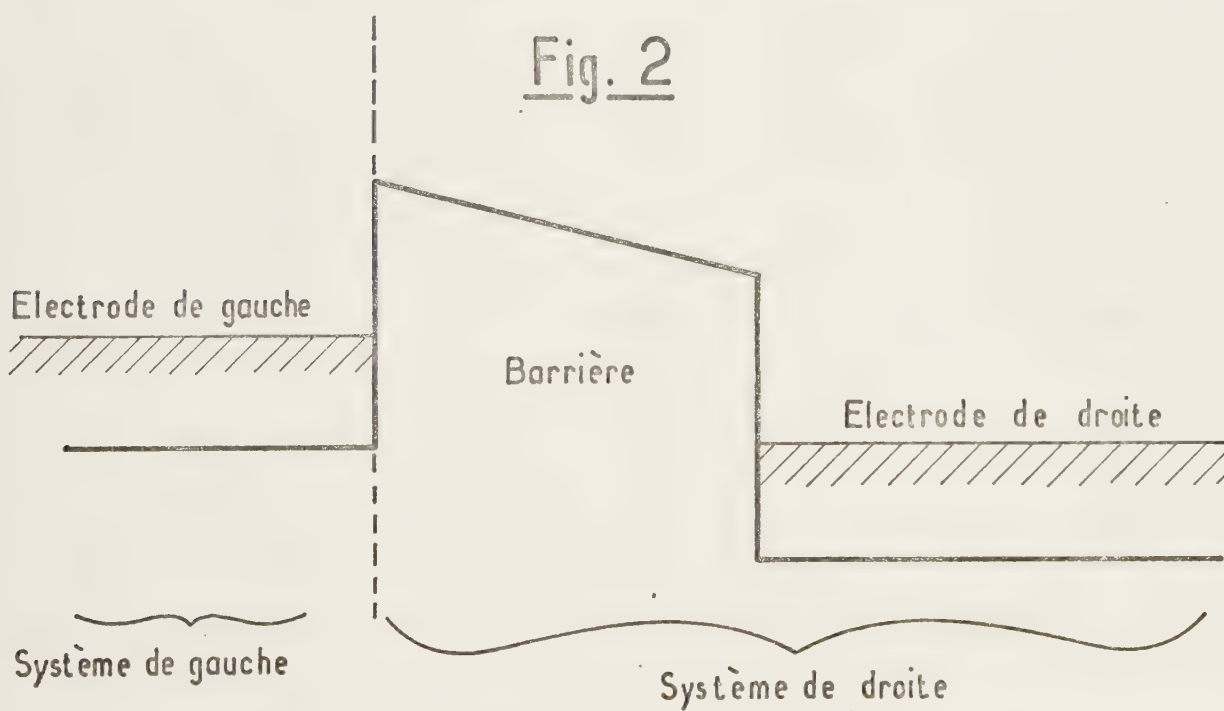


Fig. 3

Nous allons maintenant exprimer l'hamiltonien du système total comme somme des hamiltoniens des systèmes de gauche et de droite isolés et d'un hamiltonien de couplage. Pour expliciter cet hamiltonien, nous choisirons une base de fonctions d'ondes localisées sur les sites atomiques du système. C'est dans une telle base, en effet, que la description des deux systèmes isolés de droite et de gauche est la plus naturelle : chacun de ces systèmes est défini par les sites atomiques qui le composent et sur lesquels un électron appartenant au système peut se placer. L'hamiltonien d'un système isolé décrira la possibilité pour un électron de passer d'un site à l'autre de ce système et l'hamiltonien de couplage permettra à cet électron de passer des sites de gauche aux sites de droite et vice-versa.

Dans un système homogène, les fonctions d'onde localisées que nous connaissons seraient des fonctions de Wannier. Une jonction tunnel étant par définition un système inhomogène, nous n'avons pas, au moins dans les zones inhomogènes situées au voisinage des interfaces barrière-isolant, une expression explicite de ces fonctions analogue à celle des fonctions de Wannier. Mais nous sommes assurés de leur existence et nous pourrions les construire par une méthode quelconque d'orthogonalisation d'orbitales atomiques.

Dans la suite, nous allons supposer que, dans chaque partie de la jonction, nous pouvons ignorer toutes les bandes sauf une. Cette approximation décrit de façon très satisfaisante un grand nombre de situations physiques et, de toute façon, la généralisation au cas de plusieurs bandes ne présente pas de difficulté, du moins dans le principe. Nous n'avons alors à considérer qu'une seule pseudofonction de Wannier par site.

Dans notre base, l'hamiltonien du système total s'écrit de façon générale

$$H = \sum_{I,J} T_{IJ} c_I^+ c_J$$

où c^+ et c sont les opérateurs de création et d'annihilation sur les sites du système et T_{IJ} l'élément de matrice de l'hamiltonien

entre les pseudofonctions de Wannier localisées autour des sites I et J. Désignons par des lettres grecques les sites du système de gauche et par des lettres latines ceux du système de droite. Nous décomposons l'hamiltonien précédent en trois termes : la somme des termes où I et J appartiennent tous deux au système de gauche, celle où ils sont dans le système de droite et celle où ils n'appartiennent pas au même système, soit :

$$H = \sum_{\lambda, \mu} T_{\lambda\mu} c_{\lambda}^+ c_{\mu} + \sum_{\ell, m} T_{\ell m} c_{\ell}^+ c_m + \sum_{\lambda, \ell} T_{\lambda\ell} c_{\lambda}^+ c_{\ell} + c.c.$$

Nous avons ainsi obtenu la décomposition voulue : le premier terme H_g est l'hamiltonien du système de gauche isolé, le second terme H_d celui du système de droite isolé et le troisième terme H_c est l'hamiltonien de couplage.

C'est grâce à la base de fonctions d'ondes que nous avons choisie que la séparation en trois termes s'est avérée aussi simple et aussi naturelle ; c'est elle qui est manifestement la mieux adaptée au problème. Aussi son utilisation est-elle un des traits fondamentaux de notre méthode. Par là nous nous opposons au formalisme de l'hamiltonien tunnel. Comme nous le verrons, ce formalisme part d'une décomposition de l'hamiltonien du système analogue à la nôtre, mais la base de fonctions d'onde choisie est différente, essentiellement en ce qu'elles ne sont pas localisées à l'intérieur des systèmes isolés de droite et de gauche. On conçoit alors que la définition des hamiltoniens des systèmes isolés soit délicate.

Nous pouvons un peu simplifier le problème en utilisant le fait que, dans toutes les jonctions tunnel, les interfaces barrière-électrode sont à peu près planes. Nous supposons que la jonction est invariante par toute translation parallèle à ces plans d'interface. A priori ce n'est pas en général le cas, au moins parce que les réseaux cristallins ne se raccordent pas au niveau de l'interface. En fait, ceci ne semble avoir aucune conséquence physique importante et, pour cette raison, nous ferons l'hypothèse généralement admise que la transmission est spéculaire et non diffuse. De toute façon, elle n'est

nullement fondamentale.

Cette approximation va nous permettre de nous ramener à un problème à une dimension. Et c'est surtout pour cette raison que nous la faisons, car, d'un point de vue topologique, l'effet tunnel se présente comme un problème à une dimension, que les interfaces soient planes ou non : on étudie le passage d'un électron d'un côté à l'autre de la barrière. Remarquons que la technique des chemins de Feynman est particulièrement adaptée au traitement de ce type de problèmes, puisqu'à une dimension, la description de tous les chemins possibles allant d'un point à un autre est facilitée. En particulier pour passer d'une électrode à l'autre les électrons doivent tous parcourir un même trajet à travers la barrière. La technique que nous utiliserons ne sera pas celle de Feynman mais elle lui sera équivalente car elle nous permettra également de voir que la propagation d'un électron d'un site à un autre résulte de l'interférence de tous les chemins qu'il peut prendre pour aller du premier au second. Notons encore le rôle essentiel que joue l'utilisation des fonctions d'ondes localisées dans notre description. Elles sont parfaitement adaptées à ce système inhomogène qu'est la jonction, elles nous permettent de suivre la trajectoire de l'électron lorsqu'il passe d'une électrode à l'autre en traversant la barrière.

Nous passons donc en transformée de Fourier pour les deux coordonnées parallèles à l'interface. Moyennant l'hypothèse précédente de transmission spéculaire, le moment $\vec{k}_{//}$ parallèle à cet interface sera conservé dans tous les processus. Nous pouvons donc travailler à $\vec{k}_{//}$ donné et nous n'aurons à la fin qu'à sommer les contributions des différents $\vec{k}_{//}$. Si $\vec{k}_{//}$ est donné, nous sommes ramenés à un problème à une dimension, celle de la coordonnée perpendiculaire à l'interface. Désormais, les indices repérant les sites ne seront plus relatifs qu'à cette coordonnée, c'est-à-dire qu'en fait ils repèreront des plans de sites parallèles à la jonction.

Venons en maintenant à notre approximation principale,



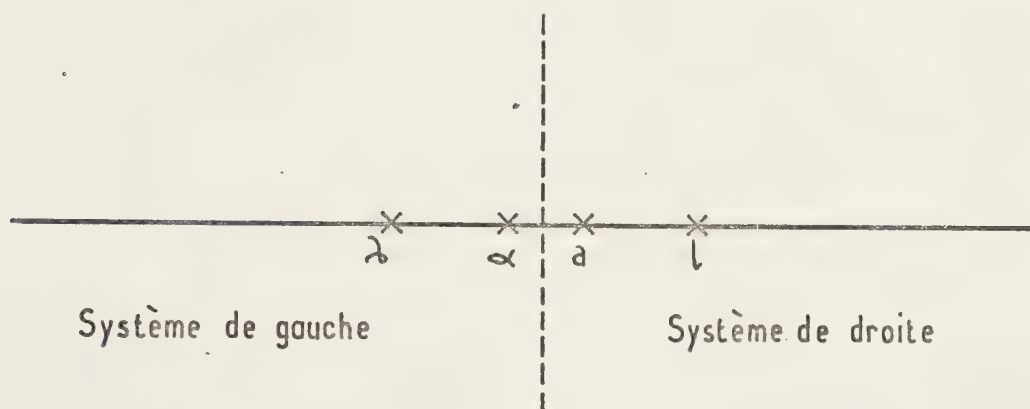


Fig. 4



qui a pour but de simplifier l'hamiltonien de couplage

$$H_c = \sum_{\lambda, \ell} T_{\lambda\ell} c_{\lambda}^+ c_{\ell} .$$

Les $T_{\lambda\ell}$ sont les éléments de matrice de l'hamiltonien entre deux pseudofonctions de Wannier, l'une située sur un site du système de gauche, l'autre sur un site du système de droite. De façon générale, un élément de matrice T_{IJ} décroît très rapidement quand la distance qui sépare les deux sites I et J s'accroît. Cela est dû au caractère local des pseudofonctions de Wannier : elles décroissent très vite lorsqu'on s'éloigne du site autour duquel elles sont localisées.

Dans ces conditions, $T_{\lambda\ell}$ est négligeable dès que λ et ℓ sont éloignés l'un de l'autre de plus de quelques distances atomiques. Nous allons schématiser cette situation en supposant que $T_{\lambda\ell}$ n'est non nul que si λ est le dernier site α (le plus à droite) du système de gauche, et ℓ le premier site a (le plus à gauche) du système de droite. Autrement dit, nous faisons une hypothèse de couplage premiers voisins pour l'hamiltonien de couplage H_c (cf. Fig 4).

Cette hypothèse va apporter une simplification notable à nos calculs. Cependant, nous voulons insister sur ce point, elle n'est nullement indispensable, du moins sous cette forme simpliste, au développement ultérieur du calcul. Nous pouvons en effet tenir compte, dans H_c , de tous les termes $T_{\lambda\ell}$ où les sites λ et ℓ sont plus éloignés que premiers voisins et si nous voulons effectuer un calcul explicite, nous pouvons en retenir un nombre fini: cela alourdit fortement les calculs, mais n'apporte aucun fait physique nouveau. (En effet, cette approximation ne modifie pas les données physiques fondamentales qui sont la structure des électrodes et de la barrière isolante).

De plus, nous chercherons dans la suite à étendre notre traitement au cas d'une représentation continue, et non plus par sites discrets comme nous le faisons maintenant. Cette extension s'obtiendra naturellement en faisant tendre vers zéro la distance entre deux sites. Nous verrons alors que la représentation continue s'obtient de façon exacte comme limite d'un modèle à couplage entre voisins. L'utilisation de cette approxi-



mation s'impose donc particulièrement.

Nous supposons, pour simplifier l'écriture, que les éléments de Matrice de l'hamiltonien sont réels : l'hamiltonien de couplage H_c prend finalement la forme extrêmement simple :

$$H_c = T (c_\alpha^+ c_a + c_a^+ c_\alpha) \quad \text{avec } T = T_{\alpha a} = T_{a\alpha}$$

où, rappelons-le, α est le dernier site du système de gauche et a le premier de celui de droite.

B - Le calcul du courant

La première étape est de déterminer l'opérateur courant dans la représentation que nous utilisons. Nous pouvons en principe calculer le courant en n'importe quel point de la jonction : l'état du système étant stationnaire, nous trouverons partout le même résultat, à condition qu'il soit calculé de façon exacte et non approchée.

La forme très simple du couplage entre les deux systèmes de droite et de gauche nous incite alors à calculer ce courant à la séparation entre les sites α et a . L'opérateur courant J vaut alors :

$$J = e \frac{d}{dt} (N_d) = \frac{ie}{\hbar} \left[H, \sum_l c_l^+ c_l \right]$$

où N_d est le nombre d'électrons se trouvant sur les sites du système de droite. Dans l'hamiltonien, seul H_c ne commute pas avec N_d . Il vient donc :

$$J = \frac{ie}{\hbar} \left[H_c, c_a^+ c_a \right] = \frac{ie}{\hbar} T (c_\alpha^+ c_a - c_a^+ c_\alpha)$$

Le courant est proportionnel à la différence entre le nombre d'électrons transférés de α à a (c'est le terme $c_a^+ c_\alpha$) et le nombre d'électrons transférés de a à α (c'est le terme $c_\alpha^+ c_a$), ce qui était prévisible "a priori". La simplicité du résultat vient de ce que le transfert des électrons du système de gauche à celui de droite ne peut se faire, par l'intermédiaire de H_c , qu'entre les sites α et a . Si nous ne faisons pas



l'hypothèse de couplage entre premiers voisins pour l'hamiltonien de couplage H_c , l'expression de l'opérateur courant serait plus compliquée.

La valeur du courant s'obtient en prenant la valeur moyenne de J dans l'état considéré :

$$\langle J \rangle = \frac{ie}{\hbar} T \{ \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_a \rangle - \langle c_a^{\dagger} c_{\alpha} \rangle \}$$

Nous sommes ainsi ramenés à la détermination des deux fonctions de corrélation $\langle c_{\alpha}^{\dagger}(t) c_a(t) \rangle$ et $\langle c_a^{\dagger}(t) c_{\alpha}(t) \rangle$. Si le système était à l'équilibre, nous utiliserions les techniques de perturbation habituelles, le système non perturbé étant l'ensemble des systèmes de gauche et de droite isolés et l'hamiltonien de perturbation étant H_c . Mais ici le système est hors d'équilibre et nous devons utiliser la méthode plus élaborée de Keldysh. Comme nous l'avons précisé, nous n'entrons pas dans les détails de cette méthode que l'on trouvera dans les publications données en appendice.

Nous donnons simplement le résultat du calcul pour en examiner les principales caractéristiques. Nous considérerons d'abord le cas d'électrons libres. On trouve alors :

$$\langle J \rangle = \frac{2\pi e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega |T \Lambda^r(\omega)|^2 \rho_{\alpha}(\omega) \rho_a(\omega) [f_g(\omega) - f_d(\omega)] \quad (I,1)$$

où $\rho_{\alpha}(\omega)$ (resp. $\rho_a(\omega)$) est la densité d'état au site α (resp. a) à l'énergie ω pour le système de gauche (resp. droite) isolé ; f_g et f_d sont les facteurs de Fermi des systèmes de gauche et de droite isolés : à température nulle $f_g - f_d$ n'est non nul que si l'énergie ω est comprise entre les niveaux de Fermi des deux systèmes, ce qui assure que seuls les électrons se trouvant dans cette gamme d'énergie peuvent participer au courant, comme on pouvait l'attendre. Enfin $|T \Lambda^r(\omega)|^2$ constitue le coefficient de transfert à l'énergie ω , dont nous ne donnerons pas l'expression explicite (cf. 12).

Notons les principales caractéristiques de ce résultat. Le

coefficient de transfert a une dépendance en énergie ce qui est en accord avec les autres théories récentes de l'effet tunnel. Notons que cette dépendance en énergie signifie que l'électron met un temps fini pour franchir la barrière. Un coefficient de transfert indépendant de l'énergie voudrait dire que l'électron traverse instantanément la barrière ce qui est physiquement inacceptable. Remarquons que le problème que nous avons traité peut être considéré comme un problème de diffusion où l'hamiltonien non perturbé est celui de deux systèmes isolés $H_g + H_d$ et où le potentiel diffuseur a pour hamiltonien H_c . Nous avons calculé la matrice $\mathcal{E}$ de ce potentiel, dont l'élément de matrice entre les sites α et a (le seul qui permette aux électrons de passer d'un système à l'autre) est simplement $T \Lambda(\omega)$. Nous trouvons donc une matrice $\mathcal{E}$ dépendant à la fois des sites et de l'énergie ; si nous passions d'une représentation spatiale à une représentation en vecteur d'onde, nous aurions, comme il se doit, une matrice $\mathcal{E}$ dépendant à la fois de l'impulsion et de l'énergie.

Voyons maintenant ce que devient ce résultat dans le cas d'une jonction métal-isolant-métal si nous essayons de l'exprimer en fonction des propriétés des électrodes et de la barrière isolées. Dans notre division de la jonction en deux systèmes, le système de gauche, comme nous l'avons dit, est l'électrode de gauche, le système de droite est formé de la réunion de l'isolant et de l'électrode de droite. Nous explicitons cette dernière composition en écrivant l'hamiltonien H_d du système de droite comme somme des hamiltoniens H_i et H'_d de l'isolant et de l'électrode de droite isolée, et d'un hamiltonien de couplage H'_c , de façon tout à fait analogue à ce que nous avons fait pour la jonction toute entière. Nous ferons de même une approximation de premiers voisins pour l'hamiltonien de couplage H'_c . Continuons à désigner les sites de l'isolant par des lettres latines et, pour ceux de l'électrode de droite, utilisons des lettres grecques primées. Si b est le dernier site de l'isolant et α' le premier de l'électrode de droite (Fig. 5), nous aurons



Fig. 5

$$H'_c = T' (c_{\alpha}^+, c_b + c_b^+ c_{\alpha}'),$$

En explicitant ainsi les grandeurs caractérisant le système de droite en fonction de celles de l'isolant, de l'électrode de droite et du couplage, nous obtenons pour le courant la nouvelle expression :

$$\langle J \rangle = \frac{2\pi e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega |U^R(\omega)|^2 \rho_{\alpha}(\omega) \rho_{\alpha'}(\omega) [f_g(\omega) - f_d(\omega)] \quad (I.2)$$

Pour obtenir ce résultat nous avons dû expliciter le fait que, dans la barrière isolée, il n'y a pas de densité d'états. En effet, la barrière est un isolant et la gamme d'énergie correspondant aux électrons qui tunnelent tombe dans la bande interdite de cet isolant. Précédemment, lorsque nous considérions la barrière connectée à l'électrode de droite, il existait une densité d'états non nulle au site a qui était en fait induite par la densité d'états au site α' de cette électrode au travers de la barrière. En effet à l'énergie considérée, il existe des états dans l'électrode de droite, et quand barrière et électrode sont connectées, ces états ont une queue exponentielle dans la barrière et créent donc une densité d'états en a. Il est donc naturel qu'en explicitant, $\rho_a(\omega)$ soit remplacé par $\rho_{\alpha'}(\omega)$. $|U^R(\omega)|^2$ est le nouveau coefficient de transfert. On a explicitement

$$U^R = T T' G_{ab}^R(\omega)$$

où G^R désigne la fonction de Green retardée pour le système entier. $G_{ab}^R(\omega)$ décroît exponentiellement avec la distance ab et c'est de ce terme que provient la décroissance exponentielle bien connue du courant tunnel lorsque l'épaisseur de la barrière augmente.

Notons que G^R est la fonction de Green de la jonction tout entière et non de la barrière isolée seulement. Cela signifie que $G_{ab}^R(\omega)$ décrit la propagation d'un électron d'énergie α de a en b, mais que cet électron peut, pendant ce trajet, faire des excursions dans les électrodes (Fig. 6). Cette renormalisation par les électrodes du trajet de l'électron dans la barrière est un des résultats importants de notre méthode.



Trajet direct d'un électron de a à b



Trajet de a à b avec une excursion dans l'électrode de gauche

Tous les trajets, comprenant toutes les excursions possibles dans les électrodes, contribuent à G_{ab} .

Fig. 6

L'expression précédente du courant peut encore se présenter sous une forme différente. En effet, pour aller d'une électrode à l'autre, un électron peut suivre des trajets différents ; il peut en particulier faire plusieurs aller-retour dans la barrière, mais de tels trajets ont une probabilité exponentiellement faible. Aussi nous pouvons ne retenir que les trajets contenant une seule fois le parcours direct de a en b, les autres étant négligeables. Dans cette approximation (qui est systématiquement faite par les autres théories de l'effet tunnel), le courant tunnel s'écrit :

$$\langle J \rangle = \frac{2\pi e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega |u^r(\omega)|^2 \tilde{\rho}_\alpha(\omega) \tilde{\rho}_{\alpha'}(\omega) [f_g(\omega) - f_d(\omega)] \quad (I.3)$$

Dans cette expression, $\tilde{\rho}_\alpha(\omega)$ est la densité d'états au site α pour l'électrode de gauche, compte tenu des incursions dans la barrière au voisinage de a. Le nouveau coefficient de transfert $u^r(\omega)$ ne correspond plus qu'au trajet direct de a vers b sans excursion dans les électrodes

$$u^r(\omega) = T T' g_{ab}^r(\omega)$$

(où $g_{ab}^r(\omega)$ est la fonction de Green décrivant la propagation d'un électron de a en b dans la barrière isolée).

C - L'influence des interactions

Un des grands avantages du formalisme que nous avons développé est la facilité avec laquelle on peut tenir compte des interactions. Elles s'introduisent de façon naturelle dans notre méthode. Nous nous sommes limités dans cette étude essentiellement au cas de l'interaction électron-phonon, bien que nous ayons également abordé des problèmes d'impuretés. Mais les résultats formels que nous avons obtenus s'appliquent à n'importe quel type d'interaction.

Nous ne reviendrons pas ici sur les difficultés de principe que pose l'introduction des interactions dans des systèmes hors d'équilibre. Indiquons seulement que la définition des quantités relatives aux électrodes isolées est délicate, mais que, grâce

à la faible transparence de la barrière, on se ramène aux définitions habituelles. Dans cette partie, nous nous contenterons de donner les résultats formels auxquels nous avons abouti en nous efforçant de les justifier physiquement. Cela sera suffisant pour la compréhension de la seconde partie. Nous reviendrons ensuite sur ces résultats dans la dernière partie, et nous les exploiterons pour analyser l'effet de l'interaction électron-phonon dans les jonctions métal-isolant-métal.

Nous avons étudié séparément l'effet des interactions dans les électrodes et dans la barrière isolante. A vrai dire, une telle séparation n'est pas toujours possible. Si par exemple nous devons considérer des processus où un électron émet un phonon dans une électrode, traverse la barrière en compagnie du phonon et le réabsorbe dans l'autre électrode, nous ne pouvons pas effectuer la séparation en question. Toutefois, nous ignorerons de tels processus, car ils semblent ne jouer aucun rôle fondamental dans les effets de phonons que l'on observe expérimentalement. En fait notre formalisme nous permet d'en tenir compte, mais l'interprétation physique des résultats n'est pas aussi claire que dans les autres cas.

Considérons d'abord les interactions dans les électrodes. Dans la formule (I.3), les contributions des électrodes et de la barrière au courant tunnel sont clairement séparées : les électrodes interviennent par leur densité d'états $\tilde{\rho}$ au voisinage de la barrière, et la barrière intervient par le coefficient de transfert $|u^r(\omega)|^2$. La présence d'interactions dans les électrodes entraîne simplement une renormalisation des "densités d'états" $\tilde{\rho}$ correspondantes. Nous reviendrons plus tard sur les conséquences pratiques de ce résultat.

Passons aux interactions dans la barrière. D'un certain point de vue, nous pouvons traiter ce cas comme le cas précédent. En effet, si nous séparons la jonction en électrode gauche d'une part, barrière et électrode droite d'autre part, les interactions dans la barrière apparaissent comme des interactions dans le système de droite. Ce point de vue ne fait pas apparaître, dans les résultats formels, la différence physique fondamentale

entre la barrière et l'électrode, c'est-à-dire que l'une est un isolant et l'autre un conducteur.

L'autre point de vue possible est de considérer que la jonction est formée de trois sous-systèmes : les deux électrodes et la barrière. Sous cet angle, les processus de barrière diffèrent radicalement de ceux des électrodes. Le processus dominant est alors l'émission d'un phonon par l'électron lorsqu'il traverse la barrière : l'énergie de l'électron n'est donc plus conservée lorsqu'il passe d'une électrode à l'autre. Le courant tunnel dû à ce type de processus est dénommé "courant inélastique".

Nous renvoyons à la référence (12) pour tous les calculs et les résultats généraux. Indiquons cependant le résultat obtenu lorsqu'on traite l'interaction électron-phonon à l'ordre le plus bas.

Si nous nous plaçons à température nulle, le courant inélastique s'écrit :

$$\langle J \rangle_{in} = \frac{2\pi e}{h} \iint d\omega d\omega' \rho_{\alpha}(\omega) \rho_{\alpha'}(\omega') \sum_n \left| \sum_i U_{n,i}^r \right|^2 \delta(\omega - \omega' - \omega_n) \quad (I.4)$$

(nous supposons que le niveau de Fermi à gauche est supérieur au niveau de Fermi à droite).

Ce courant correspond aux électrons qui partent de l'électrode de gauche avec une énergie ω qui en passant à travers la barrière émettent un phonon n d'énergie ω_n et qui arrivent dans l'électrode de droite avec l'énergie ω' . Pour avoir le courant total, il faut sommer sur toutes les énergies ω , ω' et ω_n , la fonction $\delta(\omega - \omega' - \omega_n)$ assurant la conservation de l'énergie.

Le coefficient de transfert $\sum_i U_{n,i}^r$ décrit la propagation de l'électron de a en b à travers la barrière, avec émission d'un phonon n en n'importe quel site i de la barrière (il faut sommer les contributions des différents sites avant de prendre le carré du module car il y a interférence entre ces sites).

Le terme $u_{n,i}^r$ correspondant à l'émission du phonon n au site i s'écrit :

$$u_{n,i}^r = T T' G_{ai}^r(\omega) A_{n,i} G_{ib}^r(\omega') V_i$$

où $G_{ai}^r(\omega)$ est la fonction de Green décrivant la propagation de l'électron d'énergie ω de a en i , $A_{n,i}$ est l'amplitude de l'état de phonon n au site i et $G_{ib}^r(\omega')$ correspond à la propagation de i en b avec l'énergie ω' . Enfin V_i est l'élément de matrice de l'interaction électron-phonon au site i : nous avons supposé par simplicité que cette interaction était totalement locale.

D - Passage à la limite continue

Pour terminer cette partie, nous allons indiquer sur quels principes physiques on peut se fonder pour passer de notre représentation discrète de la jonction tunnel à une représentation continue.

Nous considérerons le cas simple d'une particule isolée, la généralisation au cas d'un système de particules en interaction ne posant aucun problème.

L'hamiltonien d'un électron placé dans un potentiel quelconque s'écrit :

$$H = - \int \frac{\hbar^2}{2m} \psi^+(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) dx + \int V(x) \psi^+(x) \psi(x) dx$$

où $\psi^+(x)$ et $\psi(x)$ sont les opérateurs création et annihilation d'un électron au point x (nous nous limitons à une géométrie unidimensionnelle, la généralisation à trois dimensions est d'ailleurs évidente).

Par une intégration par parties, le précédent hamiltonien s'écrit encore :

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \int dx \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \psi^+(x) \right\} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right\} + \int dx V(x) \psi^+(x) \psi(x) \quad (1.5)$$

En représentation continue, on peut créer en tout point x_0 un électron de fonction d'onde $\delta(x-x_0)$. En représentation discrète, on ne peut créer d'électrons que sur les sites. Si l'on veut obtenir la première représentation comme limite de la seconde,

il faut faire tendre la distance a séparant deux sites vers 0. Les fonctions localisées sur les sites tendent alors vers des fonctions δ .

Plus précisément, nous pouvons remarquer qu'en représentation discrète, une fonction d'onde ϕ_i est normée par :

$$\sum_i |\phi_i|^2 = 1$$

tandis qu'en représentation continue, la fonction d'onde $f(x)$ est normée si :

$$\int |f(x)|^2 dx = 1$$

Il en résulte que pour conserver la norme, la limite continue $f(x)$ d'une fonction d'onde en représentation discrète ϕ_i doit être définie par

$$f(x) = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{\phi_i}{\sqrt{a}} \quad \text{pour} \quad x_i \leq x < x_{i+1}$$

où x_i désigne l'abscisse du site i .

De la même façon, l'opérateur $\Psi(x)$ sera la limite de $\frac{c_i}{\sqrt{a}}$. Enfin, quand a tend vers 0, $\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x)$ est la limite de

$$\frac{\Psi(x+a) - \Psi(x)}{a} \quad \text{soit encore de} \quad \frac{c_{i+1} - c_i}{a \sqrt{a}}.$$

Nous pouvons alors décomposer les intégrales apparaissant dans la définition (I.5) de l'hamiltonien en sommes d'intégrales sur les intervalles séparant deux sites. Quand a tend vers 0, l'une de ces intégrales s'écrit :

$$\int_{\text{int}} dx \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \Psi^+(x) \right\} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) \right\} \approx a \left\{ \frac{c_{i+1}^+ - c_i^+}{a \sqrt{a}} \right\} \cdot \left\{ \frac{c_{i+1} - c_i}{a \sqrt{a}} \right\}$$

En sommant les intégrales sur tous les intervalles, on voit que H est la limite de :

$$\sum_i \frac{\hbar^2}{ma^2} c_i^+ c_i - \frac{\hbar^2}{2ma^2} \sum_i (c_{i+1}^+ c_i + c_i^+ c_{i+1}) + \sum_i V_i c_i^+ c_i$$

Nous avons ainsi montré que l'hamiltonien en représentation continue était la limite d'un hamiltonien en représentation discrète n'ayant d'élément de matrice qu'entre premiers voisins. On vérifie d'ailleurs immédiatement que, dans le cas où le

potentiel V est nul, la structure de bande qui résulte d'un tel hamiltonien, soit :

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2} - 2 \times \frac{\hbar^2}{2ma^2} \cos(ka)$$

a pour limite la structure de bande des électrons libres, car :

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2} (1 - \cos ka) \simeq \frac{\hbar^2}{ma^2} \times \frac{(ka)^2}{2} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

L'approximation premiers voisins que nous avons faite pour les hamiltoniens de couplage se révèle donc particulièrement adaptée au passage à la limite continue.

En identifiant, nous voyons que le T et le T' qui intervenaient dans H_c et H'_c doivent être remplacés par $-\hbar^2/(2ma^2)$ pour passer à la limite continue. D'autre part, les limites continues des fonctions de Green s'obtiennent de la même façon que celles des fonctions d'ondes. Par exemple, la limite continue de $G_{\alpha\alpha}$, sera la limite de $G_{\alpha\alpha}/a$ quand a tend vers zéro. En appliquant ces règles, on obtient le résultat suivant pour la limite continue de la formule (I.1) :

$$\langle J \rangle = \frac{2\pi e}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^4 \int d\omega \frac{\rho_g''(\omega)}{2} \frac{\rho_d''(\omega)}{2} |G^r(\omega, \omega)|^2 (f_g - f_d)$$

La séparation entre les systèmes droite et gauche (limite commune des sites α et a) ayant lieu au point O . Ici $\rho_g''(\omega)$ (resp. $\rho_d''(\omega)$) désigne la dérivée seconde de la densité d'états $\rho_g(x)$ (resp. $\rho_d(x)$) au point O pour le système de gauche (resp. droite) isolé, et $G^r(x, x')$ est la fonction de Green pour la jonction toute entière. Toutes ces quantités dépendent naturellement, en outre, de l'énergie.

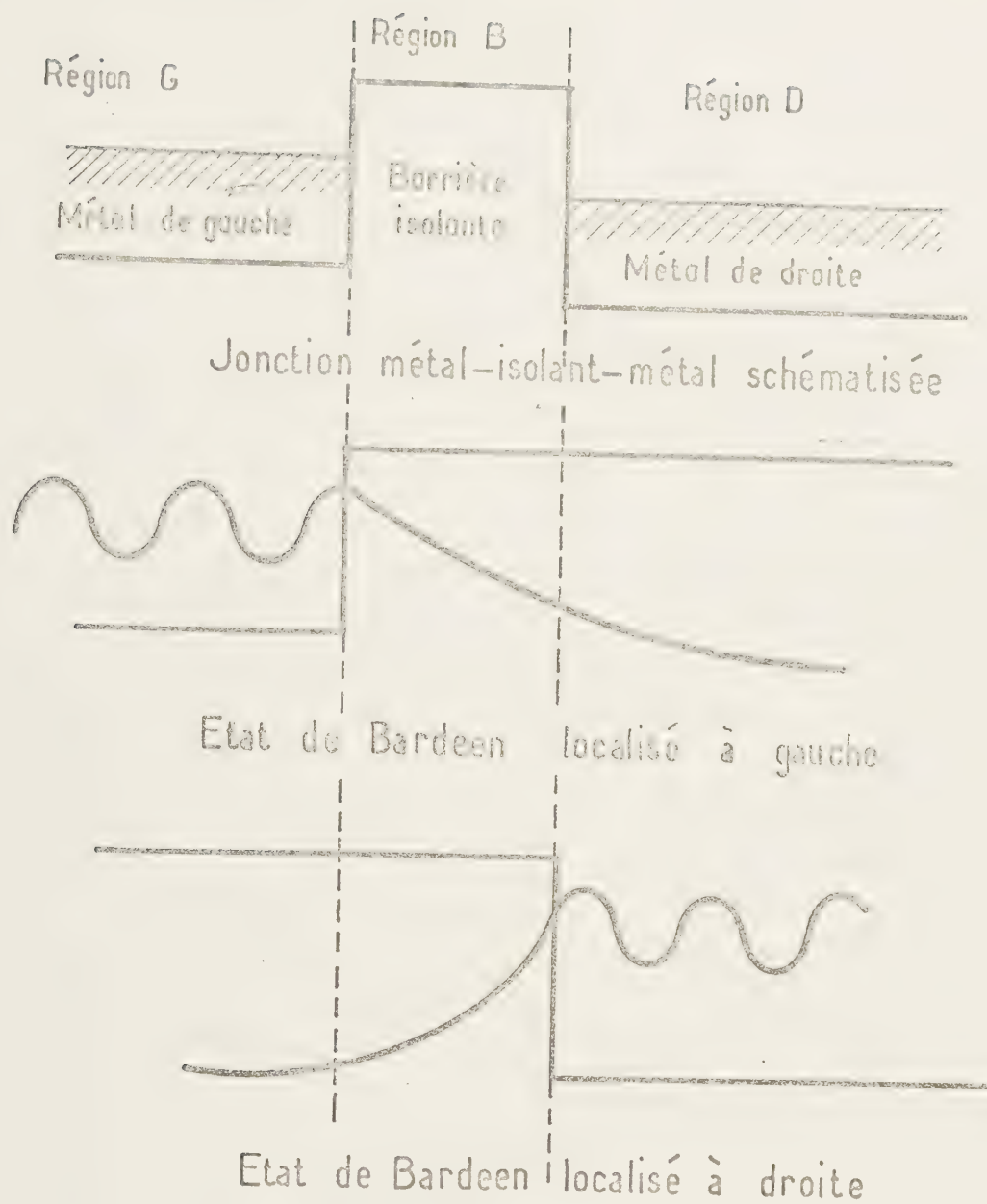
II - Les autres théories

A - La méthode de Bardeen

La plupart des théories qui ont eu pour but de traiter les effets à N corps dans le courant tunnel ont suivi l'idée qu'avait formulée Bardeen⁽²⁾. Aussi allons-nous examiner en détail son calcul, puisqu'il contient l'essentiel des idées physiques.

Considérons une jonction métal-isolant-métal (cf. Fig. 7). Appelons respectivement G et D les électrodes de gauche de gauche et de droite et B la barrière. Bardeen considère que le passage du courant correspond au transfert d'électrons d'états localisés dans l'électrode de gauche vers des états localisés dans l'électrode de droite. Les états localisés à gauche, par exemple, sont définis comme les états propres d'un système où l'on aurait une barrière qui s'étendrait à l'infini vers la droite, l'électrode D n'existant plus (cf. Fig. 7). Ces états ne sont effectivement localisés à gauche que si la transparence de la barrière est petite, c'est-à-dire si la longueur de décroissance des fonctions d'ondes dans la barrière est petite devant l'épaisseur de la barrière. Cette longueur est une fonction de l'énergie. Pour les états qui interviennent effectivement dans l'effet tunnel, cette transparence est petite.

Ces états localisés sont en fait états propres de deux hamiltoniens différents selon qu'ils sont localisés à droite ou à gauche et aucun de ces hamiltoniens n'est le vrai hamiltonien du système. Par exemple, les états localisés à gauche vérifient l'équation de Schrödinger du vrai système dans (G), dans (B) mais pas dans (D). Les états localisés à gauche et à droite ne sont donc pas orthogonaux entre eux et ne sont pas états propres du système. Aussi, si un électron se trouve initialement dans un état de gauche, il a une probabilité non nulle de se trouver ultérieurement dans un état de droite. Mais ces états localisés sont en fait quasi états propres du système : si, par exemple,



On a schématisé la jonction en ignorant le champ électrique dans la barrière

Fig.7

Ψ_g est un état d'énergie E_g localisé à gauche :

$$(H - E_g) \Psi_g(x) = 0 \quad \text{pour } x \in G, B$$

$$(H - E_g) \Psi_g(x) \approx 0 \quad \text{pour } x \in D$$

La dernière relation est due à ce que $\Psi_g(x)$ est exponentiellement petit pour $x \in D$.

La probabilité de transition d'un état de gauche vers un état de droite est donc faible et on peut la calculer au premier ordre. Nous allons d'ailleurs voir que la quantité petite qui intervient dans cette probabilité est $(H - E_g) \Psi_g(x)$. Aussi la faible transparence de la barrière joue-t-elle un rôle fondamental. Elle assure la presque localisation des états à droite et à gauche, leur quasi-orthogonalité et le fait qu'ils soient presque états propres du système. Ces propriétés ne sont cependant qu'approchées et il ne peut en être autrement. En effet, elles ne peuvent être exactes que si la barrière est parfaitement opaque, mais dans ce cas, il ne peut plus passer de courant. On ne peut donc pas améliorer de cette façon le calcul de Bardeen.

Bardeen considère ensuite l'effet d'interactions dans les électrodes dans le cas où les excitations à gauche et à droite sont des états de quasiparticules entre lesquels les électrons sont transférés. Le courant s'obtient alors simplement en substituant dans l'expression trouvée en l'absence d'interactions les fonctions d'ondes des quasiparticules à celles des particules libres. Nous rappelons donc brièvement son calcul dans le cas d'un système sans interactions, et, pour plus de simplicité, nous négligerons l'antisymétrisation des fonctions d'ondes (ce qui est ici sans importance) pour nous ramener au problème à une particule.

Si l'électron est dans un état Ψ_{g_0} localisé à gauche à l'instant $t = 0$, sa fonction d'onde à l'instant t peut s'écrire :

$$\Psi(t) = a(t) \Psi_{g_0} e^{-iE_g t/\hbar} + \sum_d b_d(t) \Psi_d e^{-iE_d t/\hbar}$$

(au premier ordre on peut négliger le couplage avec les états de



gauche autres que ψ_{g_0}). La probabilité de transition vers un état donné d de droite est : $|b_d(t)|^2$. Un calcul de perturbation dépendant du temps, au premier ordre, très banal fournit un résultat analogue à la règle d'or de Fermi pour la probabilité de transition par unité de temps d'un état g vers un état d :

$$\frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_d | H - E_g | \psi_g \rangle| \delta(E_d - E_g)$$

Remarquons que l'on n'a pas $\langle \psi_d | \psi_g \rangle = 0$, les fonctions localisées à droite et à gauche n'étant plus orthogonales. De même, rappelons que $H\psi_g = E_g \psi_g$ n'est vrai que dans D et dans B. Par conséquent, dans l'élément de matrice :

$$M_{gd} = \langle \psi_d | H - E_g | \psi_g \rangle = \int_D \psi_d^* (H - E_g) \psi_g d^3r$$

l'intégrale ne porte que sur la région D puisqu'autre part la quantité à intégrer s'annule. Bardeen remarque alors que, dans cette région, pour des raisons analogues, l'intégrale

$$\int_D \psi_g (H - E_d) \psi_d^* d^3r \text{ est nulle.}$$

En soustrayant cette intégrale de M_{gd} , on obtient :

$$M_{gd} = \int_D (\psi_d^* H \psi_g - \psi_g H \psi_d^*) d^3r$$

puisque la conservation de l'énergie de l'électron lorsqu'il passe passe d'une électrode à l'autre implique : $E_d = E_g$ (cette conservation de l'énergie s'exprime par la présence du $\delta(E_d - E_g)$ dans la probabilité de transition).

Dans la différence $\psi_d^* H \psi_g - \psi_g H \psi_d^*$, la partie énergie potentielle de H disparaît. Il reste l'énergie cinétique.

Après intégration par parties, on obtient finalement :

$$M_{gd} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{x=x_{bd}} (\psi_d^* \frac{\partial}{\partial x} \psi_g - \psi_g \frac{\partial}{\partial x} \psi_d^*) dy dz$$

où x est la coordonnée perpendiculaire à la jonction, x_{bd} le plan



séparant les régions B et D, y et z les coordonnées parallèles à la jonction.

En fait, nous pourrions reprendre le raisonnement en considérant que les intégrales précédentes portaient non plus sur la région D, mais sur D plus n'importe quel morceau adjacent de la barrière. Donc l'intégrale de surface définissant M_{gd} peut, en fait, porter sur n'importe quelle surface pourvu qu'elle soit à l'intérieur de la barrière. On peut remarquer que M_{gd} est proportionnel à l'élément de matrice de la composante x de l'opérateur densité de courant

$$\frac{\hbar}{2mi} \psi^+ \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^+}{\partial x} \quad \text{entre les états } \psi_d \text{ et } \psi_g.$$

Ainsi le calcul de Bardeen montre que le courant tunnel s'exprime uniquement à l'aide des fonctions d'onde des états droite et gauche dans la barrière, sans qu'on ait besoin de les connaître dans les électrodes. Il en tire parti pour montrer que la probabilité de transition n'est pas modifiée lorsqu'une électrode devient supraconductrice et qu'en conséquence, il suffit de tenir compte de la modification de la densité d'états pour obtenir le courant tunnel.

La méthode qu'a utilisée Bardeen est particulièrement simple et intéressante. Mais, malheureusement, elle ne se présente pas sous l'aspect d'un formalisme aisé à manipuler. En effet, c'est dans le principe un calcul de perturbation au premier ordre. Mais il n'y a pas d'hamiltonien qu'on traite comme une perturbation. Ce qui est traité comme perturbation, c'est le fait que les fonctions d'ondes ne soient pas exactement orthogonales, ni localisées, ni réellement fonctions propres de l'hamiltonien. L'introduction de l'hamiltonien tunnel par Cohen, Falicov et Phillips tend à remédier à cette difficulté.

B - L'hamiltonien tunnel de Cohen, Falicov et Phillips

Dans leur traitement de l'effet tunnel pour une jonction ayant une électrode supraconductrice, Cohen, Falicov et Phillips⁽⁴⁾ reprennent l'idée de base du calcul de Bardeen : considérer que le courant tunnel correspond aux transitions d'électrons entre des états de gauche et des états de droite et traiter ces

transitions à l'ordre le plus bas.

Cependant les états localisés à droite et à gauche sont pour eux orthogonaux et localisés dans les électrodes : ils sont en effet définis comme états propres des hamiltoniens H_d et H_c des électrodes de droite et de gauche isolées. Ils peuvent alors définir explicitement un hamiltonien H_t qui transfère les électrons d'une électrode à l'autre, c'est tout simplement la différence entre l'hamiltonien total du système H et ceux des électrodes isolées. Ils écrivent donc l'hamiltonien du système :

$$H = H_g + H_d + H_t$$

Cohen, Falicov et Phillips traitent H_t au premier ordre pour calculer le courant. Rappelons que, dans la méthode de Bardeen, le courant passe parce que les états localisés à droite et à gauche ne sont ni orthogonaux, ni états propres du système. C'est la raison pour laquelle Bardeen n'introduit pas d'hamiltonien de transfert.

Toutefois, pour le problème qu'ils traitent, Cohen, Falicov et Phillips n'ont pas besoin d'une expression explicite de H_t . Ils en choisissent d'ailleurs une expression approchée adaptée à leur problème. Prange⁽¹⁵⁾ a repris la question en se demandant s'il était effectivement possible de mettre l'hamiltonien du système sous la forme proposée par Cohen, Falicov et Phillips et il a clairement posé le problème : il faut définir dans le système des états localisés, les uns à droite, les autres à gauche, qui soient orthogonaux et qui forment chacun dans leur région des ensembles complets, leur ensemble formant un ensemble complet du système.

C'est en effet la condition nécessaire et suffisante à l'existence de la décomposition proposée par Cohen, Falicov et Phillips.

La conclusion de Prange est qu'une telle décomposition et un tel ensemble de fonctions n'existent pas. Plus précisément, Prange essaye de voir si des états localisés du genre de ceux de Bardeen peuvent convenir à la définition de l'hamiltonien tunnel.

Aussi élimine-t-il, comme il le précise, les fonctions qui seraient trop singulières. Nous avons en fait montré, dans ce qui précède, qu'il existe une solution au problème et effectivement les fonctions correspondantes sont très singulières puisque ce sont des fonctions δ .

Nous avons en effet divisé le système en systèmes de droite et de gauche isolés et nous avons défini un hamiltonien de couplage. Une telle décomposition est identique à celle proposée par Cohen, Falicov et Phillips. Nous avons d'abord étudié une représentation discrète du système dans laquelle les fonctions de base étaient des pseudofonctions de Wannier localisées sur les sites du système. Nous sommes ensuite passés à la limite continue où les fonctions de base deviennent des fonctions δ centrées sur tous les points du système. Un tel ensemble de fonctions satisfait intégralement aux conditions posées par Prange. Ce qui est un peu moins évident, c'est que le couplage provient d'un morceau de l'énergie cinétique, comme nous avons pu le voir à la fin de la précédente section. Lorsqu'on passe à la limite continue, l'hamiltonien de couplage disparaît et le couplage se présente sous la forme d'une condition aux limites sur les fonctions d'onde.

Cependant, si notre décomposition et celle de Cohen, Falicov et Phillips sont identiques dans la lettre, elles ne le sont pas dans l'esprit. En effet, pour eux, l'hamiltonien tunnel H_t est censé décrire tous les processus qui se produisent dans la barrière, car les deux systèmes isolés qu'ils considèrent sont les électrodes de droite et de gauche. En particulier, H_t est petit, puisqu'il décrit la traversée de la barrière. Tout au contraire, dans notre division de la jonction en systèmes de droite et de gauche, nous avons inclus la barrière dans l'une de ces deux systèmes. Notre H_c est donc grand, puisqu'il ne décrit pas la traversée de la barrière. En fait, Cohen, Falicov et Phillips ne retiennent de la barrière qu'une seule fonction : celle de transférer les électrons d'un métal à l'autre, c'est-à-dire que leur H_t joue le rôle d'une matrice $\mathcal{E}$. Aussi l'analogue de leur H_t n'est pas notre H_c , mais la matrice $\mathcal{E}$ de notre système dont



l'élément de matrice entre un site i de l'électrode de gauche et un site j de l'électrode de droite est :

$$\mathcal{E}_{ij} = T T' G_{ab}(\omega) \delta_{ia} \delta_{j\alpha'}$$

Cohen, Falicov et Phillips écrivent donc l'hamiltonien tunnel :

$$H_t = \sum_{k,q} T_{kq} c_k^+ c_q + \text{h.c.}$$

où les états k (resp. q) sont les états propres de l'électrode de gauche (resp. droite). Ils considèrent T_{kq} comme petit et supposent d'ailleurs $T_{kq} = T$ indépendant de k et de q . De telles approximations sont justifiées dans leur cas, où la structure de la barrière n'a aucun intérêt et où seules les propriétés d'électrodes sont concernées. Elles reviennent à négliger l'effet de renormalisation des électrodes par excursions dans la partie de la barrière contigüe à l'électrode concernée (c'est-à-dire à remplacer dans notre formalisme $\tilde{\rho}$ par ρ) et surtout à ignorer la dépendance en énergie du coefficient de transfert. En outre, un tel formalisme ne tient pas compte du caractère local de la densité d'états, puisqu'il revient à poser

$$\rho_\alpha(\omega) = \sum_k |\Psi_k(\alpha)|^2 \delta(\omega - \epsilon_k) = \rho(\omega) \times \text{Cte}$$

où $\rho(\omega)$ est la densité d'états de l'électrode isolée dans la masse. Autrement dit, on admet que la fonction d'ondes $\Psi_k(\alpha)$ de l'état propre k au site α est indépendante de l'état et de l'énergie considérés. Toutes les approximations faites par Cohen, Falicov et Phillips sont en fait justifiées par la faible gamme d'énergie (de l'ordre du meV) où se trouvent tous les états concernés : on peut négliger la dépendance en énergie du coefficient de transfert et des termes de renormalisation.

Mais la dépendance en énergie du coefficient de transmission ne peut plus être négligée dès que l'on veut tenir compte des degrés de liberté internes à la barrière. Les états localisés à gauche et à droite de Cohen, Falicov et Phillips ne sauraient constituer un ensemble complet de fonctions pour tout le système, ils ne peuvent décrire convenablement un électron dans la barrière.



On doit donc introduire d'autres états (qui correspondent à la barrière isolée). L'hamiltonien tunnel comportera alors des termes couplant ces états de barrière à ceux des électrodes et d'autres couplant directement les électrodes. Lorsqu'on utilise notre représentation qui est celle qui s'adapte le plus naturellement à la topologie du problème, on constate que le couplage entre électrodes est négligeable et que les autres couplages peuvent être choisis de façon très simple. On est ainsi conduit à écrire :

$$H_t = H_c + H_b + H'_c$$

en utilisant les notations précédemment introduites.

C - Le développement de l'hamiltonien tunnel

1) Les calculs ultérieurs qui utilisent le formalisme de l'hamiltonien tunnel mêlent les idées de Bardeen et la formulation de Cohen, Falicov et Phillips. Plus précisément, les états localisés à droite et à gauche de Bardeen sont pris comme états propres des hamiltoniens des électrodes isolées de Cohen, Falicov et Phillips. On peut alors identifier leur T_{kq} avec l'élément de matrice M_{kq} de Bardeen ce qui fournit à T_{kq} une expression explicite alors qu'il n'y en avait précédemment aucune.

C'est cette présentation de l'hamiltonien tunnel que Prange⁽¹⁵⁾ a plus précisément discutée. Ses objections s'appliquent alors : on ne peut trouver d'états localisés du genre de ceux de Bardeen qui puissent satisfaire aux conditions nécessaires qu'il énonce. Il faut donc abandonner au moins une condition. On peut, par exemple, renoncer à la localisation des états. Prange montre alors qu'on peut mettre l'hamiltonien sous la forme proposée par Cohen, Falicov et Phillips. Mais physiquement, de tels états sont sans intérêt : en effet un électron amené sur la gauche de la jonction peut déjà se trouver, sans avoir tunnélé, dans un état appartenant à l'électrode de droite, puisque les états ne sont pas strictement localisés. Ces états ne sont manifestement pas adaptés à la description de l'effet tunnel.



Une autre solution consiste à prendre des états localisés, mais non orthogonaux, par exemple ceux de Bardeen. Les états de gauche sont alors complets dans l'électrode de gauche, mais comme les états de droite ont également une queue à gauche, on obtient au total un ensemble surcomplet : on ne peut donc dire d'un état donné qu'il se trouve par exemple à droite ou à gauche puisqu'il n'admet pas une décomposition unique sur les états de base. On a donc un obstacle très grave analogue au précédent.

Toutefois, on se rend compte qu'en limitant la contribution des termes de haute énergie, c'est-à-dire en exprimant un état donné à l'aide d'états de base ayant essentiellement la même énergie que lui, on peut parvenir à une décomposition unique. Prange l'a montré explicitement sur un modèle simple de jonction tunnel symétrique. On peut admettre que ce procédé est dans le principe généralisable, quoique le calcul pratique soit fort peu réalisable.

Cependant, pour décrire des états électroniques de barrière et non des états s'étendant dans les électrodes, le problème reste entier ; en effet les états de droite et de gauche sont en gros du même ordre de grandeur vers le milieu de la barrière (alors que, dans une électrode, seuls sont importants les états localisés dans cette électrode, si l'on ne considère pas les états de haute énergie). Les états de Bardeen ne sont donc pas du tout adaptés à la description des phénomènes de barrière.

Une fois cette approximation faite, Prange met à nouveau l'hamiltonien du système sous la forme :

$$H = H_g + H_d + H_t$$

mais ici H_g et H_d ne commutent pas puisque leurs états propres, qui sont les états de Bardeen, ne sont pas orthogonaux. Puis Prange calcule le courant tunnel. Il montre qu'on obtient le même résultat que si les états de Bardeen étaient orthogonaux. et que H_g et H_d commuteraient. Autrement dit les deux effets se



compensent, résultat qui n'était a priori nullement évident et qui n'est d'ailleurs vrai qu'au premier ordre. La définition de H_t est d'ailleurs modifiée lorsqu'on admet que les états de Bardeen commutent.

Le calcul de Prange est donc une démonstration a posteriori de la validité de l'hamiltonien tunnel utilisé avec des états localisés non orthogonaux. Cette démonstration est faite sur un cas simple, en l'absence d'interaction. Il peut paraître raisonnable d'admettre que le résultat reste valable, en l'absence d'interaction, dans des jonctions tunnel plus compliquées. Mais on ne peut vraiment rien dire si l'on tient compte des interactions, en particulier des interactions dans la barrière. L'application de l'hamiltonien tunnel à une telle structure relève donc de l'hypothèse. C'est cependant cette formulation de l'hamiltonien tunnel (avec des états localisés non orthogonaux) qui a été constamment utilisée dans les applications ultérieures.

Il existe un autre obstacle de principe à l'utilisation de l'hamiltonien tunnel. En effet, pour cet exposé, nous avons choisi pour la commodité les états de Bardeen comme états localisés. Mais en fait tout autre choix conviendrait aussi bien, c'est-à-dire que pour définir les états localisés à gauche, par exemple, nous pouvons mettre à la place de l'électrode de droite n'importe quelle forme de potentiel (pourvu que ce potentiel rende cette région classiquement inaccessible à un électron). Il n'est alors pas évident que le résultat ne dépende pas du choix de fonctions localisées qui a été fait, en particulier en présence d'interactions localisées dans la barrière.

2) L'hamiltonien tunnel, tel que nous venons de le présenter, a permis d'étudier l'influence des interactions sur le courant tunnel. Nous allons examiner maintenant les résultats essentiels qui ont été obtenus ainsi que les obstacles pratiques qui se sont présentés. Envisageons d'abord le cas des interactions dans les électrodes.



Il n'y a aucun obstacle de principe à généraliser le calcul de Cohen, Falicov et Phillips. En l'absence d'interaction, une électrode donnée intervenait par sa densité d'états ; en présence d'interaction, c'est une densité d'états renormalisée par les interactions qui va intervenir. Le calcul montre que c'est plus précisément la densité spectrale $A(k, \omega)$ qui intervient.

En l'absence d'interaction, les états excités correspondent simplement à la création d'un électron (ou d'un trou) dans des états électroniques déterminés :

$$A(k, \omega) = \delta(\omega - \epsilon_k)$$

En présence d'interactions (sauf dans l'approximation des quasi-particules), $A(k, \omega)$ n'a plus une forme simple. La somme des $A(k, \omega)$ sur tous les k fournit évidemment la densité d'états à l'énergie ω .

Le calcul, sans difficulté, fournit le résultat suivant pour le courant tunnel :

$$J = \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{k,q} |T_{kq}|^2 \int d\omega A_g(k, \omega) \delta(\omega - \epsilon_q) [f_g(\omega) - f_d(\omega)] \quad (II.1)$$

Nous avons supposé qu'il n'y avait d'interactions que dans l'électrode de gauche.

L'hypothèse généralement faite est que pour les k et q importants pour le courant tunnel, T_{kq} peut être considéré comme une constante T indépendante de k et de q . Alors la sommation de $A_g(k, \omega)$ sur les k fournit la densité d'états à gauche $\rho_g(\omega)$, la sommation de $\delta(\omega - \epsilon_q)$ sur les q fournit la densité d'états à droite $\rho_d(\omega)$ et le courant devient

$$J = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\omega \rho_g(\omega) \rho_d(\omega) [f_g(\omega) - f_d(\omega)]$$

Ainsi les interactions dans les électrodes n'interviennent que pour modifier les densités d'états correspondantes. En fait, lorsqu'on y regarde de plus près, l'approximation consistant à prendre T_{kq} constant permet d'éliminer plusieurs difficultés très gênantes.

En effet, en l'absence d'interactions, on a $A_g(k, \omega) = \delta(\omega - \epsilon_k)$.



La conservation de l'énergie ω d'un électron qui tunnelle assure donc : $\epsilon_k = \epsilon_q$. On peut alors sans difficulté prendre T_{kq} égal à l'élément de matrice de Bardeen. En présence d'interactions, on a : $A_g(k, \omega) \neq \delta(\mu - \epsilon_k)$ si bien que $\epsilon_k = \epsilon_q$ n'est plus vérifié. Or nous avons vu que le calcul de Bardeen avait été fait en supposant précisément que l'état de gauche et l'état de droite, entre lesquels l'électron transite, doivent avoir même énergie soit précisément $\epsilon_k = \epsilon_q$. On ne peut donc plus prendre son résultat pour exprimer T_{kq} .

Une autre façon de voir cela est de remarquer que, si $\epsilon_k \neq \epsilon_q$, l'élément de matrice de Bardeen

$$M_{kq} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{x=x_0} \left(\psi_k^* \frac{\partial}{\partial x} \psi_q - \psi_q \frac{\partial}{\partial x} \psi_k^* \right) dy dz$$

dépend du plan x_0 de la barrière dans lequel il est évalué. La difficulté à laquelle on se heurte n'est pas seulement de ne pas avoir d'expression explicite pour T_{kq} , c'est qu'on ne voit pas, quel sens physique attribuer à un tel coefficient de transfert pour un électron partant d'une électrode avec une énergie ϵ_k et arrivant dans l'autre avec une énergie différente ϵ_q . A quel endroit de la barrière doit-on dire que l'électron change d'énergie ? (la valeur de T_{kq} dépend évidemment de cet endroit, tout comme dans le résultat de Bardeen). Cette difficulté est contenue dans le principe même de l'hamiltonien tunnel, puisque l'existence de T_{kq} est admise et non démontrée à partir de résultats antérieurs.

Les auteurs ont donc été forcés d'avoir recours à des recettes sans justification correcte pour obtenir une expression cohérente de T_{kq} , lorsqu'ils ne pouvaient se contenter de le prendre constant. Nous n'examinerons pas ces différentes expressions de T_{kq} , mais toutes présentent une grosse difficulté qui a été mise en évidence pour la première fois par Appelbaum et Brinkman⁽¹⁶⁾.

En effet, à énergie ω donnée, la densité spectrale $A_g(k, \omega)$ décroît rapidement, mais dans le principe ne s'annule pas lorsque ϵ_k devient très grand. En particulier, ϵ_k peut devenir suffisamment grand pour que l'électron qui tunnelle à cette énergie passe en fait au-dessus de la barrière de potentiel ; T_{kq} devient alors



exponentiellement grand par rapport à ceux correspondant à des ϵ_k plus petits. Il en résulte que, malgré la petitesse de $A_g(k, \omega)$, on peut obtenir, pour des valeurs élevées de ϵ_k , des contributions très importantes au courant tunnel (II.1). Or, de telles contributions, correspondant à des électrons passant au-dessus de la barrière tunnel, n'ont manifestement aucun sens physique.

La solution à cette difficulté, ainsi d'ailleurs qu'à la précédente, a été fournie par Appelbaum et Brinkman. Ils observent en effet que T_{kq} traduit le passage de l'électron dans la barrière tunnel. Or ϵ_k et ϵ_q sont des quantités relatives dans deux électrodes. En fait, c'est l'énergie ω qui caractérise l'électron dans la barrière : il n'y a pas alors d'ambiguïté puisque cette énergie se conserve dans toute la jonction. Appelbaum et Brinkman proposent de remplacer T_{kq} par un $T_{kq}(\omega)$.

En l'absence d'interaction dans la barrière, ils prennent ce $T_{kq}(\omega)$ égal à l'élément de matrice de Bardeen avec $\omega = \epsilon_k = \epsilon_q$ et $k_{//} = q_{//}$ que nous désignerons par $M(\omega, k_{//})$. On a alors

$$T_{kq}(\omega) = M(\omega, k_{//}) \delta_{k_{//}, q_{//}}.$$

En revanche, en présence d'interactions dans la barrière, le problème de la détermination du $T_{kq}(\omega)$ reste entier.

Cette solution a l'avantage de lever les difficultés liées au coefficient de transfert T_{kq} , mais elle lève une difficulté de principe de même taille. En effet, on est conduit à utiliser des éléments de matrice de l'hamiltonien de transfert H_t qui ont une dépendance en énergie, c'est-à-dire que l'hamiltonien de transfert lui-même dépend de l'énergie. De tels pseudo-hamiltoniens dépendant de l'énergie se rencontrent dans d'autres théories où l'on utilise ensuite des méthodes self-consistantes pour les calculer. On peut considérer que la forme précédente de l'hamiltonien tunnel relève du même état d'esprit la forme et l'expression exacte de l'hamiltonien sont justifiées et calculées d'après l'expression qu'on obtient pour le courant tunnel en l'absence d'interaction.



En fait, nous avons déjà mis en évidence l'origine de la difficulté qui se présente ici. La dépendance en énergie du coefficient de transmission de la barrière provient de la structure de la barrière elle-même. Si comme dans la méthode de l'hamiltonien tunnel, on n'introduit pas cette structure, si on ne tient pas compte correctement des degrés de libertés électroniques de la barrière, on n'a aucun espoir de voir sortir du calcul une dépendance en énergie ; on est donc forcé de l'introduire a priori donc d'utiliser un pseudohamiltonien dépendant de l'énergie. Tout au contraire dans notre méthode, nous avons introduit la structure de la barrière par l'hamiltonien H_b de la barrière isolée. Nous avons alors calculé la matrice $\mathcal{G}$ de notre problème, qui, comme nous l'avons vu, est l'exacte correspondant du $T_{kq}(\omega)$, et la dépendance en énergie en a découlé naturellement.

3) Nous allons maintenant examiner l'application du formalisme de l'hamiltonien tunnel à l'étude des interactions dans la barrière, qui est due essentiellement à Duke et ses collaborateurs⁽⁵⁾. Rappelons tout de suite que c'est en présence d'interactions dans la barrière que l'utilisation des états de Bardeen paraissait le moins justifiée pour décrire le système, ces états formant un ensemble surcomplet dans la barrière.

Dans la méthode utilisée par Duke, on tient compte des interactions avec des phonons par exemple, en rajoutant à l'hamiltonien de transfert de Cohen, Falicov et Phillips, que nous continuerons à appeler H_t , un autre hamiltonien H_t^P destiné à tenir compte de processus impliquant des phonons. H_t décrit le transfert d'un électron de gauche à droite, H_t^P décrit le même transfert avec émission d'un ou plusieurs phonons. Notre démarche est complètement différente puisque nous avons simplement introduit l'hamiltonien d'interaction électron-phonon dans la barrière, ce qui a pour effet de modifier la propagation dans la barrière. C'est cette modification, que l'on peut exprimer de façon systématique en traitant l'hamiltonien d'interaction en perturbation, ce qui introduit dans le courant tunnel de nouveaux termes correspondant au passage de l'électron d'une électrode à



l'autre avec émission ou absorption de phonons dans la barrière. Dans le formalisme de Duke, la possibilité de tels processus est introduite a priori, on est donc sûr de les retrouver dans le résultat final. Mais cette introduction se fait sans démonstration et le problème se pose de savoir comment évaluer correctement l'amplitude relative de ces processus et leurs interférences. En pratique, les éléments de matrice de H_t^D entre les états gauche et droite k et q sont pris égaux à :

$$\langle k | \Delta H_D | q \rangle$$

où ΔH_D est l'hamiltonien de couplage électron-phonon dans la barrière.

Cette hypothèse est justifiée uniquement par sa vraisemblance. Elle détermine complètement l'hamiltonien H_t^D . La suite du calcul est alors, dans le principe, sans difficulté ; H_t^D est traité, tout comme H_t , en perturbation au premier ordre. Soulignons que H_t et H_t^D sont considérés indépendamment, le courant total étant simplement la somme des courants dûs à chacun de ces hamiltoniens. Or les transferts d'électrons dûs à H_t et à H_t^D étant cohérents, il existe forcément des interférences entre ces deux canaux. En particulier, Duke considère que H_t et H_t^D produisent chacun un courant élastique dont la somme est le courant élastique total ; cela n'a manifestement pas grand sens.

En fait, la méthode de l'hamiltonien tunnel a le défaut d'introduire trop d'inconnues aussi bien pratiques que théoriques. Dès qu'on observe un désaccord de l'expérience avec la théorie, il devient impossible de démêler si l'on a commis une erreur physique ou si c'est la théorie qui est fautive à la base. Comme ce formalisme part d'une hypothèse qui ne se déduit pas en général des premiers principes, on ne peut résoudre de façon sûre aucune difficulté comme nous l'avons vu pour la détermination de T_{kq} .

Remarquons encore qu'on ne voit nullement apparaître à l'aide de ce formalisme un de nos résultats les plus importants, à savoir que c'est la densité d'états d'une électrode au voisinage de la barrière qui intervient dans le courant tunnel. Cela est dû



à l'utilisation comme base des états de Bardeen. Ils sont en effet complètement délocalisés à l'intérieur d'une électrode donnée et s'adaptent mal à la description de la surface de l'électrode. L'hamiltonien tunnel se borne à décrire le transfert d'un état délocalisé à un autre délocalisé. La description de la surface n'est cependant pas impossible par cette méthode, mais elle se traduit par une dépendance complexe de $T_{kq}(\omega)$ en fonction de k et de q .

Notons enfin qu'il n'apparaît, avec l'utilisation de l'hamiltonien tunnel, aucun lien entre les phénomènes d'interaction dans les électrodes et ceux qui se produisent dans la barrière. Or un tel lien existe nécessairement. Cela est particulièrement évident si l'on considère la barrière de Schottky d'une jonction métal-semiconducteur. En effet cette barrière appartient physiquement au semiconducteur et les interactions qui s'y produisent sont les mêmes que dans la région conductrice. Nous avons vu que, dans notre méthode, nous pouvions considérer que la barrière appartenait au système de droite ou bien la considérer indépendamment. On passe en fait très aisément de l'une à l'autre description et leur équivalence est complète. Bien au contraire, cette relation n'est nullement évidente lorsqu'on applique le formalisme de l'hamiltonien tunnel. Nous allons voir que d'autres théories de l'effet tunnel rétablissent partiellement cette relation. Nous reviendrons d'ailleurs, dans la dernière partie, sur la comparaison entre effet de barrière et effet d'électrode.

D - La théorie d'Appelbaum, Brinkman et Zawadowski

Zawadowski⁽⁸⁾ fut le premier à reprendre le problème de l'effet tunnel à la base pour tenir compte d'éventuelles interactions dans la barrière. La question fut ensuite reprise indépendamment par Appelbaum et Brinkman⁽⁷⁾.

Quoique, en apparence assez éloignées, les deux méthodes sont en fait très proches car l'état d'esprit dans lequel le problème est abordé est le même. C'est simplement l'idée de Bardeen qui est reprise : on essaie de représenter l'électrode de gauche



isolée, par exemple, par un "système à gauche" qui se déduit de la jonction réelle en remplaçant l'électrode de droite par la barrière que l'on prolonge à l'infini vers la droite (Fig. 7). On peut en principe calculer toutes les quantités relatives à ce système, dit "problème de gauche". On résoud de même le "problème de droite". On cherche ensuite à calculer le courant tunnel en fonction des solutions des problèmes de droite et de gauche.

Les formalismes des deux méthodes sont assez différents mais les résultats sont exprimés à l'aide des mêmes données de base, et le résultat final est le même pour les deux méthodes. Par leur principe même, elles présentent l'avantage de la méthode de Bardeen : aucune hypothèse de base analogue à celle d'un hamiltonien tunnel n'est faite, on a donc en principe la possibilité d'examiner la validité des approximations. Mais, comme nous le verrons plus loin, elles fournissent une description mal adaptée à l'étude des phénomènes de barrière.

Les résultats en présence d'interactions dans les électrodes nous paraissent bien justifiés. Ils ont d'ailleurs été vérifiés par Davis dans certains cas particuliers. Pour notre part, nous avons vérifié qu'en l'absence d'interactions dans la barrière et en effectuant notre coupure au milieu de la barrière, nous retrouvons le résultat de Zawadowski, Appelbaum et Brinkman, à condition que leur courant soit aussi calculé au milieu de la barrière (nous avons également utilisé l'approximation BKW dans la barrière). Cela justifie donc a posteriori leur calcul. En revanche, la validité de ce résultat semble douteuse en présence d'interactions dans la barrière, tous les obstacles de principe que nous avons précédemment évoqués restant valables.

Nous allons examiner plus en détail le formalisme des deux méthodes et commencer par celle d'Appelbaum et Brinkman, d'aspect plus simple et plus proche de la démarche de Bardeen. Leur méthode consiste simplement à reprendre le calcul de Bardeen, sans faire l'approximation des quasiparticules. Le calcul aboutit à une expression analogue pour l'élément de matrice de transfert d'un électron :



$$M_{mn} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{x=x_j} dy \left[\langle m | \psi'(r) | 0 \rangle_d \frac{\partial}{\partial x} \langle 0 | \psi(r) | n \rangle_g \right. \\ \left. - \langle n | \psi(r) | 0 \rangle_g \frac{\partial}{\partial x} \langle m | \psi^*(r) | 0 \rangle_d \right]$$

où l'intégrale est prise sur un plan $x = x_j$ quelconque de la barrière comme pour l'élément de matrice de Bardeen. Le transfert considéré fait passer l'électrode de droite de l'état fondamental $|0\rangle_d$ à l'état excité $|m\rangle_d$ (qui contient un électron de plus que $|0\rangle_d$) tandis que l'électrode de gauche passe du fondamental $|0\rangle_g$ à l'état excité avec un électron de moins $|n\rangle_g$. Remarquons combien cette décomposition de l'état du système en produit d'un état de gauche par un état de droite est sujette à caution en présence d'interactions dans la barrière. Nous allons revenir plus loin sur ce problème.

L'expression précédente est tout à fait semblable à celle obtenue par Bardeen et s'y ramène si l'on suppose que les états propres des électrodes gauche et droite sont correctement décrits par un modèle de quasiparticules. Le courant tunnel s'en déduit immédiatement par

$$J = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{m,n} |M_{mn}|^2 \delta(E_{mn} - E_0)$$

et s'exprime très facilement à l'aide des fonctions de Green des électrodes de gauche et de droite isolées.

Appelbaum et Brinkman incluent dans leur calcul la possibilité d'interactions dans la barrière. En fait, de nombreux points du calcul restent très discutables en présence de telles interactions.

De façon générale, l'appartenance de la barrière aux deux systèmes "gauche" et "droite" à la fois crée de graves difficultés. Appelbaum et Brinkman évitent en pratique ce problème en ne considérant que des excitations localisées dans l'espace nettement plus près d'une électrode que de l'autre. Dans ces conditions il apparaît normal et correct d'englober ces excitations dans la définition de l'électrode la plus proche et il n'y a plus de difficulté de double appartenance. Mais le problème d'excitations qui pourraient se propager à travers la barrière, ou bien localisées



au milieu de la barrière reste entier. De même on ne peut aborder le problème d'interactions non locales dans la barrière, comme l'interaction électron-phonon par exemple.

Ainsi la méthode d'Appelbaum et Brinkman paraît correcte pour traiter des interactions localisées dans les électrodes ou dans la région de la barrière proche des électrodes. Remarquons qu'on peut traiter sur le même pied avec ce formalisme, des interactions dans la barrière et dans les électrodes, ce qui constitue un progrès notable par rapport à la formulation de l'hamiltonien tunnel. Cette méthode permet en particulier d'envisager de façon précise les effets dus à l'existence de l'interface électrode-barrière. Zawadowski, Appelbaum et Brinkman ont ainsi pu étudier l'influence d'impuretés paramagnétiques ou encore de modes de phonons localisés situés près de l'interface. Leur méthode a été utilisée plus récemment par Davis⁽¹⁷⁾ pour l'étude de jonctions métal-semiconducteur.

Considérons plus rapidement le formalisme de Zawadowski. Il utilise également la résolution des problèmes gauche et droite dont les fonctions de Green sont G_g et G_d . Mais il évite de compter deux fois la barrière comme Appelbaum et Brinkman. Il définit en effet deux fonctions de coupure f_g et f_d qui ne varient que dans la barrière, telles que l'on ait partout $f_g + f_d = 1$ et f_g variant de 1 à 0 lorsqu'on traverse la barrière de gauche à droite. Il peut alors écrire l'hamiltonien du système

$$H = H_g f_g + H_d f_d$$

où H_g et H_d sont les hamiltoniens correspondant aux problèmes gauche et droite. Cela suppose les interactions dans la barrière locales (en fait Zawadowski montre qu'il suffit que les self-énergies soient locales dans la barrière). De cette façon, la barrière n'est comptée qu'une fois. Ayant ainsi exprimé H en fonction de H_g et H_d , il peut en déduire la fonction de Green G de la jonction en fonction de G_g et de G_d , et ensuite le courant.

Ce formalisme est en principe plus séduisant et plus rigoureux que celui d'Appelbaum et Brinkman. En pratique, il



est plus difficile à mettre en oeuvre. Tout d'abord Zawadowski cherche à résoudre le problème par un développement en perturbations. Or celui-ci ne peut être valable qu'à faible énergie, car à haute énergie la barrière n'est plus un obstacle au passage du courant. Il est donc obligé de couper les états de hautes énergies. Une difficulté plus grave se présente avec les fonctions f_g et f_d . En effet, si elles facilitent la présentation du problème, le résultat final ne doit néanmoins pas en dépendre. Or elles ne disparaissent pas spontanément et leur élimination n'est pas facile, ni physiquement claire. Enfin il faut noter que dans le principe, sa méthode ne pourrait être correctement développée qu'en utilisant le formalisme de Keldysh pour les systèmes hors d'équilibre.

En fait, il est vraisemblable que les difficultés rencontrées dans la méthode plus explicite de Zawadowski existent aussi dans celle, plus elliptique, d'Appelbaum et Brinkman.

En résumé, on peut reprocher à l'ensemble des précédentes théories l'incertitude et la confusion auxquelles elles conduisent ; la raison principale en est le choix inadéquat des fonctions de base utilisées pour décrire la jonction, qui pousse à des approximations dont il est difficile de délimiter la portée. Il en résulte en particulier que l'on ne peut identifier avec confiance les concepts expérimentaux et théoriques. Cette défiance est bien mise en évidence par l'attitude de Davis, qui n'a admis la validité du résultat d'Appelbaum, Brinkman et Zawadowski qu'après l'avoir vérifiée dans un cas particulier par un calcul où la portée des approximations apparaissent clairement. Notre méthode est au contraire exempte de ce type de reproche.



III - Discussion des résultats sur l'effet de l'interaction électron-phonon

Dans cette dernière partie, nous faisons brièvement le point à partir de nos résultats théoriques, sur la validité des concepts qui sont habituellement utilisés pour dépouiller les résultats expérimentaux concernant l'effet de l'interaction électron-phonon dans la caractéristique tunnel. La confrontation entre la théorie et l'expérience a finalement conduit à opposer les effets de barrière aux effets d'électrodes, les effets inélastiques aux effets de renormalisation et les effets pairs aux effets impairs* dans les caractéristiques

$$\frac{d^2 I}{dV^2} (V).$$

Nous voulons montrer ici que de telles distinctions sont dans une certaine mesure arbitraires et ne reflètent pas toutes des différences physiques. Naturellement tous ces effets sont liés entre eux et nous examinerons également ces corrélations.

Il faut d'abord noter que physiquement, l'opposition entre effets d'électrodes et effets de barrière est quelque peu conventionnelle. En effet, si dans une jonction métal-isolant-métal, la barrière est une entité physiquement distincte des deux électrodes, une telle distinction est plus difficile à admettre dans le cas d'une jonction métal-semiconducteur. La barrière de Schottky fait alors partie intégrante du semiconducteur et il peut paraître arbitraire de distinguer la partie électrode de la partie barrière du semiconducteur. D'autre part, si dans une jonction métal-isolant-métal, on s'intéresse à l'effet des phonons, il faut remarquer que la barrière d'oxyde n'est pas un réflecteur acoustique parfait : les oxydes étant en général plus durs que les métaux, les phonons de haute fréquence de la barrière sont à peu près confinés dans la région isolante, alors que ceux des électrodes (basse fréquence) se propagent aussi dans la barrière. Si l'on s'intéresse à l'effet des phonons des électrodes, la question se pose alors de savoir dans quelle région, électrode

* Nous appelons effet pair dans la caractéristique $\frac{d^2 I}{dV^2}(V)$, un effet donnant une modification de la courbe $\frac{d^2 I}{dV^2}(V)$, symétrique par rapport à l'axe $V = 0$.



ou barrière, leur interaction avec les électrons influence le plus le courant tunnel. Nous verrons que les expériences permettent justement de penser que leur effet le plus important vient de l'interaction entre un électron et la queue dans la barrière d'un phonon de l'électrode. Cette situation est d'ailleurs clairement reflétée par la diversité des traitements théoriques : si Duke et ses collaborateurs traitent la partie électrode et la partie barrière de façon totalement différente, la méthode de Zawadowski, Appelbaum et Brinkman conduit au contraire à traiter tout en bloc. C'est ce point de vue que nous pensons adopter pour traiter les jonctions métal-semiconducteur à l'aide de notre méthode ; il correspond mieux à la physique de la jonction. Cependant, l'opposition barrière-électrode peut être justifiée a posteriori par l'analyse de l'expression finale de la partie du courant liée à la présence des interactions.

A) Considérons d'abord les effets de barrière. Les interactions dans la barrière conduisent à des processus inélastiques correspondant à l'émission (ou, à température non nulle, à l'absorption) de phonons réels. En revanche, les phénomènes de renormalisation, associés aux émissions et absorptions de phonons virtuels, sont exponentiellement négligeables, essentiellement à cause de l'absence de densité d'états dans la barrière isolée.

Comme nous le verrons, cela n'est plus vrai quand l'interaction a lieu dans les électrodes ; le passage d'un régime à l'autre se produit à l'interface barrière-électrode sur quelques couches atomiques de la barrière (à condition que la barrière soit assez haute, car c'est la rapide décroissance exponentielle des fonctions d'onde quand on pénètre dans l'isolant qui provoque le brusque passage d'un régime à l'autre).

Comme il apparaît clairement sur la formule (I.4), l'existence des processus inélastiques dans la barrière conduit toujours à une augmentation du courant. Ce résultat vient justifier le concept de "nouveau canal" fréquemment utilisé dans la littérature : dans les premières expériences qui mirent en évidence l'existence de processus inélastiques dans la barrière⁽¹⁸⁾, on interpréta les résultats en disant qu'en émettant des phonons, un électron avait une possibilité



de tunneller nouvelle par rapport au tunnel élastique, que pouvoir émettre des phonons ouvrait un nouveau canal aux électrons. On expliquait ainsi l'augmentation observée du courant.

En fait, il faut dans le principe également considérer des effets d'interférence entre le tunnel en l'absence et en présence de phonons ; mais ce sont précisément les phénomènes de renormalisation dont nous avons montré qu'ils étaient négligeables. Ainsi le concept de nouveau canal correspond bien à la réalité physique.

Notons enfin que, puisque le courant augmente avec la tension à cause des effets inélastiques, les interactions dans la barrière produisent des structures impaires sur la caractéristique $I(V)$ donc également impaires sur la caractéristique $\frac{d^2 I}{dV^2}(V)$.

Donc en résumé, les phénomènes prépondérants dans la barrière sont les processus inélastiques qui conduisent toujours à une augmentation de courant et à des structures impaires sur la caractéristique $\frac{d^2 I}{dV^2}$.

2) L'analyse des phénomènes d'électrodes est moins simple. Comme nous l'avons vu, ces effets résultent entièrement de la modification due aux phonons de la densité d'états $\tilde{\rho}_\alpha(\omega)$ de l'électrode au point α (pour les effets de phonons dans l'électrode de gauche par exemple). Rappelons que cette densité est calculée en présence d'excursions des électrons dans la région de la barrière contigüe à l'électrode ; c'est ce qu'indique le signe tilde sur le ρ .

Comme toutes les quantités que nous allons considérer seront calculées dans de telles conditions, nous omettrons désormais ce signe.

Pour évaluer la modification de la densité d'états, nous nous limiterons à l'habituelle approximation du second ordre en interaction électron-phonon, dont Migdal a démontré la validité dans les métaux. Cette approximation permet d'utiliser une self-énergie dont l'expression est particulièrement simple. Cette self-énergie est ensuite traitée à l'ordre le plus bas. Migdal a montré que dans les métaux la self-énergie pouvait être considérée comme



locale à cause de l'effet d'écran.

Un calcul au premier ordre montre alors que la modification de la densité d'états due aux phonons s'écrit :

$$\pi \delta \rho_{\alpha}(\omega) = \sum_i \{ |g_{\alpha i}^a(\omega)|^2 \operatorname{Im} \Sigma_i^a(\omega) + \operatorname{Im} g_{\alpha i}^a(\omega) \operatorname{Re} [g_{\alpha i}^a(\omega) \Sigma_i^a(\omega)] \}$$

où Σ_i^a est la self-énergie avancée sur le site i et $g_{\alpha i}^a$ la fonction de Green avancée entre les sites α et i . Dans cette expression, nous remarquons que le premier terme est toujours positif ($\operatorname{Im} \Sigma_i^a$ est positif et directement lié à la densité d'états de phonons). En fait, il est l'exact analogue du terme qui donnait dans la barrière les effets inélastiques, c'est-à-dire l'expression (I.4). Celle-ci s'obtient d'ailleurs également à partir d'une expression ne contenant que $\operatorname{Im} \Sigma^a$. Aussi est-il tentant de dire que ce premier terme correspond aux processus inélastiques dans l'électrode. Le second terme correspond en revanche aux renormalisations qui s'étaient avérées totalement négligeables dans les processus de barrière. Ce terme est ici du même ordre de grandeur que le premier, car, contrairement au cas de la barrière, les fonctions d'ondes ne décroissent pas exponentiellement dans l'électrode. D'un autre côté, en développant ce terme, on fait apparaître $\operatorname{Re} \Sigma^a$, mais aussi $\operatorname{Im} \Sigma^a$. Aussi apparaît-il arbitraire de séparer le premier terme du second. En fait, la distinction entre effets de renormalisation et effets inélastiques ne correspond à aucune différence physique. Les deux types de termes sont les conséquences de la même interaction, des mêmes processus d'émission ou d'absorption de phonons. Notons par ailleurs que tous les processus dont nous parlons maintenant ont lieu dans l'électrode avant que l'électron ne franchisse la barrière de potentiel, que le courant existe ou non. Il n'apparaît donc pas naturel de faire une distinction dénuée de sens physique. La présence des phonons conduit simplement à une renormalisation non triviale de la densité d'états de l'électrode où apparaissent simultanément $\operatorname{Re} \Sigma$ et $\operatorname{Im} \Sigma$.

On peut mettre $\delta \rho_{\alpha}$ sous une forme plus compacte regroupant les différents termes

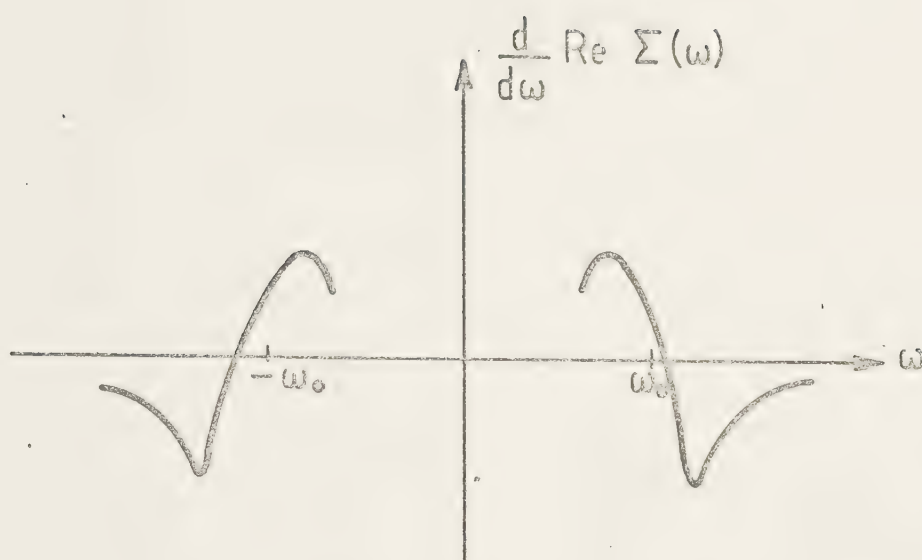
$$\pi \delta \rho_{\alpha} = \operatorname{Im} \sum_i \{ [g_{\alpha i}^a(\omega)]^2 \Sigma_i^a(\omega) \}$$



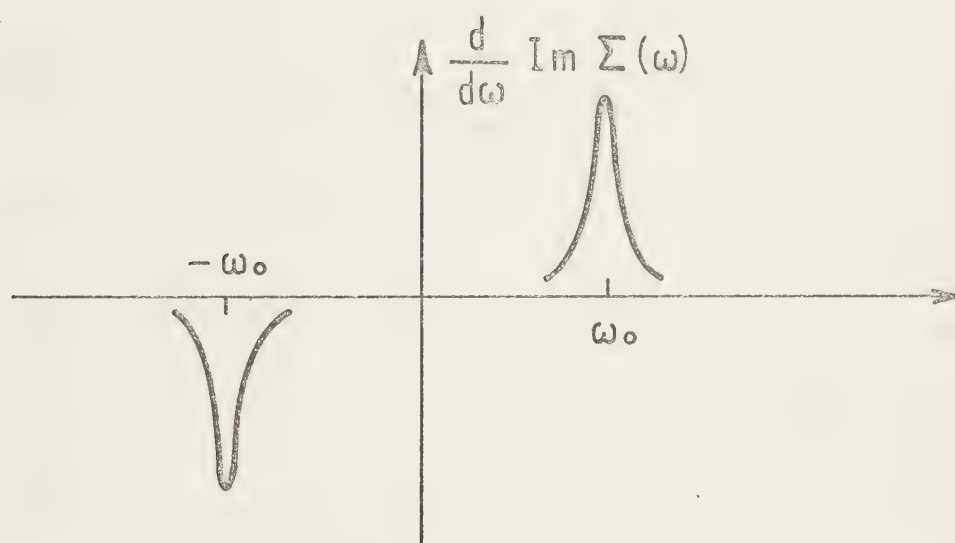
Sous cette forme nous voyons clairement apparaître un des traits majeurs des effets de phonons dans les électrodes : les contributions à $\delta\rho_\alpha$ des différents sites i de l'électrode interfèrent destructivement. En effet le propagateur $g_{\alpha i}^a(\omega)$ est une fonction très rapidement oscillante de la distance entre les sites α et i , le vecteur d'onde étant de l'ordre du vecteur d'onde k_z de l'électron dans le domaine d'énergie ω important (voisin du niveau de Fermi), et pour $k_{//} \approx 0$ (les principales contributions au courant proviennent des trajets les plus courts dans la barrière, ceux où l'électron se déplace perpendiculairement aux interfaces). En ordre de grandeur, la contribution de tous les sites est de l'ordre de la contribution du premier site ; finalement, $\delta\rho_\alpha$ est d'ordre $\rho_\alpha \frac{\omega_D}{E_f}$ (car Σ est d'ordre ω_D , la fréquence de Debye des phonons, ρ_α et g sont d'ordre $1/E_f$). Ainsi $\delta\rho_\alpha$ est petit devant ρ_α ce qui justifie l'approximation du premier ordre utilisée au départ. Cette interférence destructive entre les contributions des différents sites oppose nettement les effets d'électrodes aux effets de barrière. En effet, pour ces derniers, dans le cas d'une self-énergie locale, les contributions au courant de chaque site sont positives et s'additionnent strictement. Cela est dû à la décroissance exponentielle des fonctions d'ondes dans la barrière qui s'oppose à leur caractère oscillant dans les électrodes.

Examinons enfin la parité des effets d'électrodes. Sur l'une ou l'autre expression que nous avons utilisées, $\delta\rho_\alpha$ apparaît comme une combinaison linéaire de $\text{Re } \Sigma$ et de $\text{Im } \Sigma$. Or les coefficients de cette combinaison sont donnés par les propagateurs $g_{\alpha i}$ qui sont très sensibles à la structure du système au voisinage du site α donc de l'interface barrière-électrode. Dans l'état actuel des choses, il est hors de question de faire un calcul de ces coefficients ni de faire confiance à des résultats numériques obtenus sur un modèle particulier. On serait plutôt tenté de dire qu'étant donné l'imperfection des interfaces qui sont obtenues à l'heure actuelle, ces coefficients varient très fortement d'une jonction à l'autre. Quant à la parité, on peut montrer que $\text{Im } \Sigma$ fournit une structure impaire dans la caractéristique $\frac{d^2 I}{dV^2}(V)$,





Forme schématique de $\frac{d}{d\omega} \text{Re } \Sigma(\omega)$



Forme schématique de $\frac{d}{d\omega} \text{Im } \Sigma(\omega)$

On a supposé que le spectre de phonons présentait une dispersion faible, tous les phonons ayant une énergie voisine de ω_0

Fig.8



tout comme les effets inélastiques de barrière, tandis que $\text{Re } \Sigma$ fournit une structure paire. Plus précisément, c'est

$$\left[\frac{d}{d\omega} \Sigma(\omega) \right]_{\omega=eV}$$

qui intervient explicitement dans la caractéristique $\frac{d^2 I}{dV^2}(V)$, et $\frac{d}{d\omega} \text{Im } \Sigma(\omega)$ présente une allure dissipative et impaire, tandis que la forme de la courbe $\frac{d}{d\omega} \text{Re } \Sigma(\omega)$ est dispersive et paire (cf. Fig. 8).

Comme le résultat total est une combinaison linéaire de $\text{Im } \Sigma$ et $\text{Re } \Sigma$, il s'ensuit qu'il n'a pas de parité définie. Pour la même raison, on ne peut dire si l'effet des phonons dans les électrodes conduit à une augmentation ou une diminution du courant, l'un et l'autre sont également possibles.

En résumé, dans les électrodes les phonons provoquent des effets de renormalisation qu'il est sans intérêt physique de disséquer. Ces effets sont sans parité définie et sans signe défini.

On a observé expérimentalement que la contribution au courant due aux phonons d'électrode apparaît toujours comme une augmentation de courant et sous la forme d'une structure impaire en V . Ceci contredit évidemment notre prédiction d'après laquelle la structure ne devrait pas avoir de parité définie et pourrait correspondre aléatoirement selon les jonctions étudiées à une augmentation ou une diminution du courant. Une étude plus attentive des résultats expérimentaux montre qu'il existe en fait dans la structure une petite composante paire toujours faible devant la partie impaire (le dépouillement des résultats expérimentaux est souvent rendu difficile par le courant de fond qui est dû à la déformation de la barrière lorsque le potentiel varie). Finalement, d'après la description expérimentale, les effets d'électrode ressemblent tout à fait aux effets de barrière tels que nous les avons décrits. Cela nous a menés logiquement à conclure que les effets où apparaît la structure de phonons des électrodes sont en fait des effets dûs aux phonons d'électrode, mais se produisent dans la barrière. Cela est parfaitement possible puisque les électrodes et la barrière sont acoustiquement couplées,



les phonons des électrodes pouvant ainsi pénétrer dans la barrière avec une amplitude non négligeable (on constate que le métal est toujours plus mou que la barrière, c'est-à-dire que sa fréquence de Debye est inférieure à celle de la barrière ; la pénétration de ses phonons est donc toujours possible). Bien entendu, il subsiste une contribution de l'électrode qui est certainement responsable de la petite contribution paire ; mais à cause des interférences destructives qui n'existent que dans les électrodes, l'effet de barrière domine l'effet d'électrode.



Conclusion

Nous avons développé un formalisme permettant de calculer directement le courant d'une jonction tunnel. Il repose essentiellement sur l'utilisation d'une base de fonctions d'ondes électroniques localisées et sur l'emploi de la technique de calcul de perturbation développée par Keldysh pour les systèmes hors d'équilibre. A l'aide de ce formalisme, nous avons pu étudier l'influence des interactions sur la caractéristique courant-tension de la jonction tunnel. Nous nous sommes intéressés plus particulièrement à l'interaction électron-phonon et nous avons examiné dans le détail les différences qui existent entre les effets produits selon que l'interaction a lieu dans les électrons ou dans la barrière.

Notre méthode se distingue principalement des précédentes théories en ce qu'aucune des approximations utilisées n'est réellement indispensable. En particulier, nous avons d'abord utilisé une représentation en sites discrets, mais ensuite par un passage à la limite, nous avons étendu notre méthode à une description continue du système. L'absence de toute approximation fondamentale fait de cette méthode un outil sûr pour dégager sans ambiguïté les conséquences physiques principales de l'existence d'une interaction électronique.

Cette méthode peut se développer suivant plusieurs directions. Notons d'abord qu'un obstacle général à des résultats quantitatifs est la méconnaissance à la fois expérimentale et théorique des interfaces électrode-barrière. La propreté et la régularité des interfaces que l'on obtient actuellement sont loin d'être parfaites et, même s'il en était ainsi, on ne connaîtrait pas le raccordement exact des fonctions d'ondes des électrodes et de la barrière au niveau de ces interfaces, condition indispensable à des calculs théoriques exacts. Aussi l'étude quantitative des effets d'électrodes nous paraît-elle difficile. En revanche, les effets de barrière paraissent moins sensibles à ces problèmes d'interfaces.



Un développement immédiat de notre méthode est l'étude des jonctions métal-semiconducteur, en particulier de l'interaction électron-phonon dans ces jonctions. Nous avons vu que notre formalisme s'adaptait spécialement bien à leur étude. Remarquons aussi que le passage de la barrière de Schottky à l'électrode semiconductrice est continu, puisque le matériau ne change pas. Il n'y a donc pas de problème d'interface ce qui doit permettre d'obtenir des résultats théoriques précis.

Une autre possibilité est d'envisager des interactions avec d'autres types d'excitations élémentaires tels que photons, plasmons, magnons, modes de vibration localisées ou avec des impuretés. Nous nous sommes déjà engagés dans cette voie en traitant le cas où les électrons interagissaient dans la barrière avec des impuretés présentant un niveau résonnant. On peut également étudier l'effet photoassisté où l'on envoie sur la jonction un rayonnement électromagnétique : l'électron peut ainsi tunneller en absorbant un photon. D'un point de vue théorique, il ne se pose aucun problème nouveau. En effet, les résultats formels que nous avons obtenus s'appliquent en fait à n'importe quel type d'interaction. Pour étudier une interaction particulière, il faut essentiellement expliciter la self-énergie qui apparaît dans nos résultats généraux.

Enfin, une autre généralisation possible est l'étude de l'émission électronique à partir de surfaces, qu'il s'agisse de photoémission, d'émission de champ ou de tout autre moyen d'extraire un électron d'un solide. En effet, puisqu'il s'agit d'exprimer ce courant à l'aide de grandeurs caractérisant le solide d'une part et le vide de l'autre, notre méthode s'applique tout naturellement en prenant le solide comme système de gauche et le vide comme système de droite. Des expériences de ce type permettent d'étudier aussi bien les propriétés de surface que les propriétés de volume du solide. Aussi ce dernier champ d'application de notre méthode est-il certainement celui qui ouvre les plus vastes possibilités de développement.



Références

1. J.C.Fisher and I.Giaever J.Appl.Phys. 32,172 (1961)
2. J.Bardeen Phys.Rev.Letters 6,57 (1961)
3. J.R.Oppenheimer Phys.Rev. 31,66 (1928)
4. M.H.Cohen, L.M.Falicov and J.C.Phillips Phys.Rev.Letters 8,316 (1962)
5. A.J.Bennett, C.B.Duke and S.D.Silverstein Phys.Rev. 176,969 (1968)
6. L.C.Davis and C.B.Duke Phys.Rev. 184,764 (1969)
7. J.A.Appelbaum and W.F.Brinkman Phys.Rev. 186,464 (1969)
8. A.Zawadowski Phys.Rev. 163,341 (1967)
9. L.V.Keldysh Sov.Phys. J.E.T.P. 20,1018 (1965)
10. R.A.Craig J.Math.Phys. 9,605 (1968)
11. C.Caroli,R.Combescot,P.Nozières and D.Saint-James J.Phys.C 4,916 (1971)
12. C.Caroli,R.Combescot,P.Nozières and D.Saint-James J.Phys.C to be published
13. C.Caroli,R.Combescot,D.Lederer,P.Nozières and D.Saint-James J.Phys.C 4,2598 (1971)
14. R.Combescot J.Phys.C 4,2611 (1971)
15. R.E.Prange Phys.Rev. 131,1083 (1963)
16. J.A.Appelbaum and W.F.Brinkman Phys.Rev. 183,553 (1969)
17. L.C.Davis Phys.Rev.B 2,4943 (1970)
18. J.Lambe and R.C.Jaklevic Phys.Rev. 165,821 (1968)



